



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

TRANSPORTE ELÉCTRICO EN SUPERCONDUCTORES NO CONVENCIONALES

SHIRLEY GÓMEZ PAEZ

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá D. C., Colombia
2011

TRANSPORTE ELÉCTRICO EN SUPERCONDUCTORES NO CONVENCIONALES

SHIRLEY GÓMEZ PAEZ

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título en Doctora en Ciencias - Física

Director: Doctor William Javier Herrera
Departamento de Física Universidad Nacional de Colombia - Bogotá

Co-director: PhD Alfredo Levy Yeyati
Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada Universidad Autónoma de Madrid - España

Línea de Investigación:
Materia Condensada Teórica, Superconductividad
Grupo de Investigación:
Superconductividad y Nanotecnología

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá D. C., Colombia

© 2011

*A mi valiente esposo Mauricio mi compañero incondicional,
a mi bella e inteligente hija Valentina
y a mi gran madre Isabel el ejemplo de mi vida.*

AGRADECIMIENTOS

Durante la realización de un trabajo como este son muchas las personas que de una u otra forma sirven como apoyo, estas personas deben sentir este trabajo como suyo ya que también son responsables de su culminación. A continuación menciono algunas de ellas a las que agradezco

- *A mi Esposo el amor de mi vida, por la infinita paciencia que me tienes cada día, por esperarme cuando estoy lejos, por ser mi mejor amigo y por que eres el soporte donde me apoyo siempre.*
- *A mi Hija la niña más amorosa y especial, por entenderme y apoyarme cuando más te necesitaba.*
- *A mi Madre que con su ejemplo de vida me ha enseñado a ser la persona que soy ahora, todo lo bueno que tengo es gracias a ti.*
- *A mi Padre por su apoyo.*
- *A mis hermanos: Armando, Luz Marina y Cristina, por estar para mí.*
- *A mi sobrina Cristina, por su ayuda incondicional.*
- *A mi Maestro William Herrera, un gran amigo que me ha enseñado cosas más importantes que sólo física, su ética profesional siempre me acompañará.*
- *A mi Maestro Virgilio Niño, mi héroe personal cuya carrera y vida personal admiro.*
- *A el profesor Alfredo Levy, por acogerme en su grupo de trabajo y brindarme la oportunidad de participar en sus investigaciones.*
- *A los profesores Rafael Hurtado, la primeras personas que me enseñó a trabajar con lo que aprendí y Ramiro Cardona, quien creyó en mí.*
- *A la Universidad Nacional de Colombia, mi hogar de siempre, por las becas de estudiantes sobresalientes de posgrado y de la facultad de ciencias; así como el apoyo a través de diferentes proyectos de investigaciones.*
- *A Pablo Burset, un gran compañero de trabajo y apoyo cuando me encontraba lejos de casa, “yo soy Español, Español, Español”.*
- *A mis grandes amigos de siempre: Robinson, Nancy, Andrea y Hector Mauricio con quienes hemos recorrido el camino y con los que siempre puedo hablar de corazón.*
- *A mis amigos del Leonardo Da Vinci, la señora Chica, Maria Teresa, Javier, Diana, Sandra, Pablo Angarita, Pedro, Pablo Acosta, Alejo, Nelson, Marco, Germán, Katerina, Simona y demás, a los directivos, empleados y a la señora Zorio, su apoyo ha sido muy importante en mi vida.*

- *A mis compañeros de Grupo y oficina: Carlos, Diego, José y Guillermo, por ser neurótica a veces me disculpo.*
- *A Colciencias por su apoyo a través de las Becas de Doctorados Nacionales.*

Por último quiero agradecer a Dios que en su infinita misericordia me ha permitido vivir mi hermosa vida.

RESUMEN

Analizamos las propiedades de transporte en junturas compuestas por materiales en estado normal y superconductores no convencionales, como cupratos y superconductores con base en Fe; en éstos sistemas encontramos que las probabilidades de reflexiones de Andreev cruzadas CAR se ven afectadas por el tipo de simetría del parámetro de orden del superconductor. Analizamos también la conductancia diferencial en sistemas no convencionales formados por junturas GS y $GG'S$ ($G^{(l)}$: grafeno (película de grafeno) en estado normal y S: superconductor). Para la juntura GS la conductancia presenta diferencias para cada tipo de frontera “armchair” y “zigzag”, cuando la transparencia no es perfecta. Para junturas $GG'S$, la conductancia diferencial presenta resonancias respecto al voltaje, debidas a estados cuasiligados que se forman en G' y efectos de la paradoja de Klein cuando la película se considera como una barrera aislante. Para una juntura G_LSG_R con dopaje npn , encontramos que un electrón inyectado en la región G_L puede ser enfocado como electrón o como hueco en la región G_R , de forma análoga a un lente de Veselago en superconductividad. Finalmente, el análisis de las probabilidades CAR en los diferentes sistemas estudiados en este trabajo puede ser útil para la generación de electrones entrelazados usando superconductores.

Palabras clave: Propiedades de transporte, Superconductores no convencionales, Cupratos, Superconductores con base en Fe, Grafeno, Fronteras “armchair”, Fronteras “zigzag”, lentes de Veselago.

Abstract

We analyzed the transport properties in normal metal and unconventional superconductor junctions, like cuprates and Fe-based superconductors. We find that the crossed Andreev reflection (CAR) probability depends on the symmetry of the order parameter in the superconductor. We analyzed the differential conductance in GS and $GG'S$ unconventional systems ($G^{(l)}$: graphene (graphene's film) in normal state and S: superconductor). For GS the conductance shows a different behavior for armchair and zigzag boundaries, for non perfect transparencies. The differential conductance in a $GG'S$ junction shows resonances with voltage and Klein's paradox. The resonances are due to quasibound states appearing in G' , while Klein paradox is relevant when G' is an insulator barrier and we show that is possible with zigzag and armchair interfaces. For a graphene npn junction, we find that the system is similar to a Veselago lens, where an electron from G_L region can be focused as an electron or a hole in G_R region with negative reflection index. Finally, the CAR probability analysis on the different systems in this work may be useful to generate entangled electrons using superconductors.

Keywords: Transport properties, Unconventional superconductivity, Cuprates, Fe based-superconductors, Graphene, Zigzag edge, Armchair edge, Veselago lens.

ÍNDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN	1
1. Conceptos básicos de transporte en sistemas superconductores	9
1.1. Parámetro de Orden	9
1.1.1. Superconductores con base en Hierro	13
1.2. Reflexiones de Andreev	14
1.2.1. Reflexiones de Andreev Cruzadas	14
1.2.2. Reflexiones de Andreev en Grafeno	16
1.3. Propiedades de Transporte	18
1.3.1. Ecuaciones de Bogoliubov de Gennes	19
1.3.2. Funciones de Green para las ecuaciones de BdG	23
1.3.3. Ecuación de Dyson	25
1.3.4. Formalismo de Keldysh	27
1.3.5. Aproximación hamiltoniana	28
2. Propiedades de transporte en superconductores de alta temperatura crítica	31
2.1. Juntura de doble barrera aislante	32
2.1.1. Conductancia diferencial cruzada para la juntura de doble barrera aislante	32
2.2. Dos contactos sobre un superconductor con base en Fe	38
2.2.1. Conductancia diferencial para dos contactos sobre un superconductor con base en Fe	39
3. Transporte eléctrico en sistemas superconductores con base en grafeno	45
3.1. Efecto de las fronteras	45
3.1.1. Frontera “armchair”	47
3.1.2. Frontera “zigzag”	48
3.2. Grafeno superconductor	49
3.2.1. Frontera “armchair”	49
3.2.2. Frontera “zigzag”	50
3.3. Propiedades de transporte	51
3.3.1. Modelo hamiltoniano para interfases grafeno superconductor	51

3.3.2.	Conductancia diferencial en junturas grafeno - superconductor	59
3.3.3.	Juntura $p - n$	65
4.	Transporte eléctrico en una juntura grafeno - grafeno - superconductor	67
4.1.	Densidad de estados de la película de grafeno	67
4.1.1.	Frontera “armchair”	68
4.1.2.	Frontera “zigzag”	70
4.2.	Densidad de estados de la juntura grafeno - grafeno - superconductor	72
4.3.	Conductancia diferencial juntura grafeno - grafeno - superconductor	75
4.3.1.	Pozo de potencial	79
4.3.2.	Barrera de potencial	83
5.	Lentes para el desdoblamiento de pares de Cooper	87
5.1.	Analogía óptica para una juntura grafeno - superconductor - grafeno	88
5.1.1.	Probabilidad de transmisión en una interfase grafeno - superconductor	89
5.1.2.	Separación del punto de enfoque de electrones y huecos	91
5.2.	Procesos no locales en la juntura grafeno - superconductor - grafeno	93
5.2.1.	Cáusticas en la interfase grafeno - superconductor - grafeno	94
5.2.2.	Conductancia diferencial cruzada en la interfase grafeno - superconductor - grafeno	97
	Conclusiones y Perspectivas	99
	Conclusiones	99
	Perspectivas	103
	Publicaciones	105
A.	Soluciones para las ecuaciones de BdG en la juntura NISIN	107
B.	Amplitudes de reflexión para fronteras “armchair” y “zigzag”	111
B.1.	Frontera “armchair”	111
B.2.	Frontera “zigzag”	112
C.	Función de Green para la juntura grafeno - superconductor	113
C.1.	Frontera “armchair”	113
C.2.	Frontera “zigzag”	114
C.2.1.	Función de Green que relaciona las regiones derecha e izquierda G_{RL}	117
D.	Función de Green para la juntura grafeno - película de grafeno - superconductor	121
D.1.	Frontera “zigzag”	121
E.	Corriente eléctrica de las junturas con base en grafeno	129
E.1.	Juntura grafeno - superconductor	129
E.1.1.	Frontera “armchair”	129
E.1.2.	Frontera “zigzag”	136
E.2.	Juntura grafeno - película de grafeno - superconductor	142

INTRODUCCIÓN

Desde que Kamerlingh Onnes descubriera la superconductividad en 1911 pasaron más de cuarenta años antes de que se planteara una explicación microscópica para el estado superconductor. Aparte de la conductividad perfecta, el estado superconductor se caracteriza por la expulsión total o parcial del campo magnético; ésto fue descubierto por Walther Meissner y Robert Ochsenfel en 1933, quienes encontraron que al enfriar estaño por debajo de la temperatura crítica T_c , en presencia de un campo magnético, éste expulsa el flujo magnético de su interior. La expulsión del flujo se mantiene hasta alcanzar un campo crítico H_c para el cual el flujo magnético ingresa al superconductor regresándolo al estado normal; éste descubrimiento es conocido como efecto Meissner [1] y a los superconductores que presentan este comportamiento se les conoce como de tipo I. Posteriormente se encontraron materiales en los cuales para un campo magnético H_{c1} se presentan una exclusión total del flujo, como los de tipo I, pero para valores superiores a H_{c1} muestran una exclusión parcial del flujo, permaneciendo en el estado superconductor hasta alcanzar un valor límite H_{c2} para el cual el material regresa al estado normal. Adicionalmente entre H_{c1} y H_{c2} se presenta una mezcla del estado superconductor con el estado normal conocida como estado mixto o de vórtices, a este tipo de superconductores se les conoce como de tipo II y en ellos se observan temperaturas críticas más altas en comparación con las observadas en los de tipo I.

En 1950 aparece el trabajo fenomenológico de Vitaly Ginzburg y Lev Landau (teoría de G-L) basado en la teoría de transiciones de fase de segundo orden de Landau, en él se introduce la idea del parámetro de orden que distingue la fase superconductora de la fase normal. En 1957 John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer proponen una teoría microscópica (conocida como teoría BCS [2]) para explicar el estado superconductor, la cual establece que la superconductividad se debe a la interacción atractiva neta entre electrones con momento y espín opuesto conocidos como pares de Cooper; éste estado se caracteriza por la presencia de un potencial de pares ($\Delta = |\Delta|e^{i\varphi}$), cuyo módulo al cuadrado es proporcional a la densidad de electrones apareados y su fase expresa la correlación de largo alcance en el sistema y es proporcional al parámetro de orden propuesto por Ginzburg y Landau [3]. Una de las predicciones de la teoría BCS es que en un superconductor homogéneo el potencial de pares se manifiesta como un gap en el espectro de energía de las cuasipartículas; ésto fue verificado experimentalmente por Giaever en 1960, quien midió la característica corriente voltaje de una juntura túnel, compuesta por un metal en el estado normal, una capa aislante y un superconductor. Giaever

encontró que sólo se presentaba corriente si el voltaje aplicado es mayor al gap superconductor sobre la carga eléctrica $V > \Delta e$ [4]. A partir de estos estudios, en 1962 Josephson analizó el transporte eléctrico entre dos superconductores separados por una barrera, encontrando una corriente eléctrica debida a la transferencia de pares de Cooper entre los superconductores y que puede existir sin diferencia de potencial eléctrico. Los trabajos realizados por Giaever y Josephson dieron inicio al estudio de las propiedades de transporte a través del uso de diferentes junturas superconductoras.

En 1986 Georg Bednorz y Alex Müller, al investigar compuestos basados en el óxido de Cu , descubren los superconductores de alta temperatura crítica (HTSC por sus siglas en inglés) [5], generando interés en este tipo de materiales conocidos como cupratos; éstos sistemas cuentan con una estructura cristalina en la cual se observan planos de cobre oxígeno CuO_2 , perpendiculares al eje cristalográfico c . En estado normal la conducción eléctrica en estos planos es aproximadamente cien veces mayor que en la dirección perpendicular. Por esta razón, se puede decir que, en cuanto a la conducción eléctrica, los cupratos son sistemas cuasi - bidimensionales [6]; éstos materiales tienen diferencias notables con relación a los superconductores encontrados hasta entonces, entre las que se encuentra un diagrama de fases que depende del dopaje y presenta diferentes tipos de fases. Adicionalmente, su parámetro de orden es anisotrópico y las posibles simetrías de éste son s, d, g , ó mezclas de estas como $d+is, g+id$, etc. Las simetrías tipo s se caracterizan porque el parámetro de orden no tiene un cambio de fase relativo, mientras que para las simetrías tipo d o g éste presenta un cambio de fase de π . En simetrías mezcladas como $d + is$, la fase cambia continuamente y los estados rompen la simetría de inversión temporal [7, 8]. En el caso de los cupratos aún hay debate sobre si la interacción responsable de la superconductividad es debida a fonones [9] o a fluctuaciones de espín [10].

En el 2008 una segunda clase de superconductores de alta T_c fue descubierta; éstos pertenecen a un nuevo grupo de superconductores con base en Fe [11], los cuales tienen una T_c que varía entre 25 K y 55 K y presentan una estructura cristalina tetragonal, conformada por planos de $FeAs$ similares a los planos de CuO_2 presentes en los cupratos. Los superconductores con base en Fe se denominan de multibanda, ya que presentan múltiples parámetros de orden, que para algunos compuestos se han modelado utilizando un sistema simplificado de dos bandas. En estos casos la simetría puede ser s_{+-} , donde el potencial de pares en cada banda tienen una simetría tipo s pero con una diferencia de fase de π entre los dos o s_{++} cuando la diferencia de fase es cero [12–16]. Tanto los cupratos como los superconductores con base en Fe hacen parte de lo que se denomina superconductores no convencionales, debido a que su potencial de pares o parámetro de orden presenta anisotropía en el espacio recíproco [17, 18] y su mecanismo de apareamiento entre electrones puede ser no fonónico.

En la actualidad el conocimiento de la simetría del parámetro de orden del superconductor es un punto de partida para entender el mecanismo de interacción entre los electrones responsable de la superconductividad, como el de electrón – fonón [9] o por medio de fluctuaciones de espín [10]. La simetría del parámetro de orden puede ser estudiada con ayuda de las propiedades de transporte en interfase con superconductores; por ejemplo, en experimentos de transporte eléctrico en interfases NIS (N : metal en el estado normal, I : Aislante y S : superconductor) con cupratos [19–25], la conductancia diferencial depende de la orientación de la interfase y para una orientación (110) la conductancia es máxima a voltaje cero, presentando un pico (denominado en inglés “Zero Bias Conductance Peak” – ZBCP). La existencia del ZBCP es atribuida a la aparición de estados de energía cero (“Zero Energy States” – ZES) que se forman en la interfase SIS [26–28]; éstos estados de energía se originan por reflexiones de Andreev que ocurren cuando

un electrón desde una región normal incide sobre un superconductor y es reflejado como un hueco induciendo un par de Cooper en el superconductor. Los estados de energía cero (también llamados “midgap states” (MGS)) se pueden formar en interfases INS , SS , SIS [28, 29] y juegan un papel relevante en el efecto Josephson en junturas SIS [30–34].

Las propiedades de transporte dependen fuertemente de la simetría del potencial de pares en el caso de los superconductores con base en Fe , donde se han estudiado interfases como NS' (S' : superconductor con base en Fe) [35] y $NS'S$ [36]. El comportamiento de la conductancia diferencial en estos sistemas se explica a través de reflexiones de Andreev [37]. Una revisión de la transmisión de electrones y de los estados superficiales en superconductores de alta temperatura crítica se puede consultar en [6, 38, 39].

En junturas conformadas por regiones o contactos normales acoplados por un superconductor ocurren diferentes procesos entre los que se encuentran las reflexiones de Andreev cruzadas CAR, donde un electrón que incide desde un contacto es reflejado como hueco en el otro; en este caso el par de Cooper que se induce en el superconductor es formado por electrones provenientes de cada uno de los contactos normales. Las CAR pueden dominar el transporte y han sido objeto de estudio en los últimos años debido a la posibilidad de usarlas como una fuente de electrones entrelazados (“entangled electron pairs”) [40–48]. Recientemente se han realizado estudios de las CAR en cupratos para sistemas con dos contactos puntuales y considerando simetría d del parámetro de orden [49] y en junturas planas con superconductores con base en Fe suponiendo simetría tipo s del parámetro de orden [50].

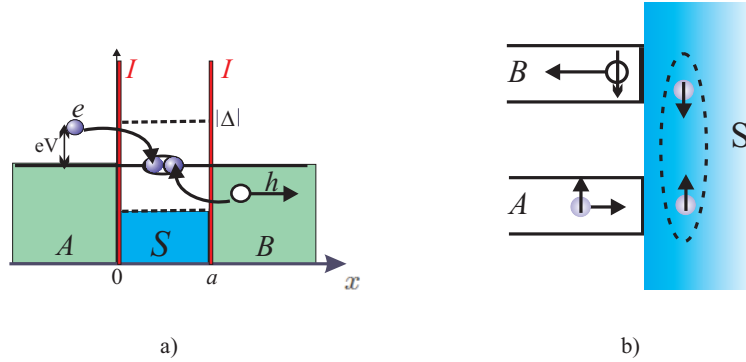


Fig. 1. Esquema de la reflexión de Andreev no local o cruzada para a) una juntura plana $NISIN$ y b) dos contactos normales acoplados a un superconductor.

Experimentalmente ha sido posible observar las reflexiones de Andreev no locales, en un primer acercamiento, utilizando sistemas más parecidos a junturas planas [48, 51] y otras donde se han usado contactos ferromagnéticos [44]. Recientemente se han utilizado sistemas cuasi-unidimensionales de dos puntos cuánticos que se acoplan a una región superconductora, para esto se han utilizado nanotubos de carbono [52] y nanoalambres [53]. En estos experimentos se ha podido identificar el efecto de las dispersiones no locales a través de los cambios en la conductancia diferencial. En este trabajo analizamos el efecto de diferentes simetrías del parámetro de orden sobre las CAR y la conductancia diferencial no local para superconductores no convencionales. En el caso de superconductores con simetría tipo d analizamos el caso de junturas planas el cual no ha sido realizado en la literatura. Para los sistemas con base en Fe estudiamos el caso de dos contactos cuánticos puntuales el cual tampoco se ha explorado en la literatura. Adicionalmente y teniendo en cuenta la evidencia experimental en sistemas con nanotubos de

carbono, analizamos las dispersiones no locales en sistemas con base en grafeno, material que describiremos a continuación.

Por otro lado en los últimos años ha habido un gran interés por el estudio de las propiedades de transporte en sistemas conformados por grafeno [54], plano independiente del grafito. El interés principal de los estudios alrededor de este material se centran en su estructura de bandas, para la cual los resultados teóricos apuntan a una relación de dispersión lineal entre la energía y el vector de onda en las esquinas de la zona de Brillouin [55], donde la estructura de bandas puede ser aproximada como valles cónicos alrededor de ellos. Por lo tanto es posible decir que los electrones en el grafeno se comportan de manera análoga a partículas relativistas de masa en reposo nula con una velocidad de la luz efectiva igual a la velocidad de Fermi; ésto había sido predicho teóricamente por Wallace [56] y ha traído un gran interés a la comunidad científica, debido a la posibilidad de establecer un análogo relativista en sistemas de materia condensada con la ecuación de Dirac [57].

El grafeno no es superconductor pero se le puede inducir superconductividad al colocarse sobre un material superconductor, debido al efecto de proximidad [58, 59]; ésto ha cobrado interés es la formación de junturas grafeno - superconductor [60–64], en las que se plantea la existencia de reflexiones de Andreev normales y especulares [60]. En el caso de las reflexiones de Andreev normales el hueco dispersado está en la misma banda del electrón incidente y es retroreflejado, mientras que en las especulares el hueco dispersado esta en la banda contraria y es reflejado de manera especular. Las reflexiones de Andreev se han usado para el cálculo de la conductancia diferencial en junturas *GIS* (*G*: grafeno) considerando pequeños anchos de la barrera aislante, donde se encuentra que la conductancia diferencial presenta oscilaciones que dependen del ancho y del potencial de la barrera aislante [61]. Recientemente se ha encontrado la conductancia diferencial para junturas *GIGS* a partir de las soluciones numéricas de las ecuaciones de *BdGD* [65] considerando fronteras tipo “zigzag”. Las reflexiones de Andreev se han observado experimentalmente en un sistema con base en grafeno conformado por un superconductor, un punto cuántico y una región normal, a través de la formación de niveles de Andreev en el punto cuántico las cuales afectan la conductancia diferencial del sistema [66].

El estudio de las interfase grafeno - superconductor es de gran importancia debido a que estos sistemas pueden servir para comprobar la denominada paradoja de Klein [67], la cual consiste en que una partícula pueda transmitirse a través de una barrera túnel con probabilidad 1. En la actualidad se han podido hacer observaciones experimentales de esta paradoja con ayuda de medidas de la conductancia diferencial [68] y de mediciones de magnetorresistencia en junturas con base en grafeno con dopaje *p - n* [69]. Las interfase grafeno - superconductor permiten observar también el efecto Josephson en junturas *SGS* [70], donde el efecto de coherencia entre las dos regiones superconductoras es establecido por el transporte eléctrico a través del grafeno. Estudios de cintas del orden de pocas capas atómicas formadas con grafeno (nanocintas) han determinado que el sistema puede presentar un comportamiento conductor o aislante dependiendo del número de filas o celdas existentes dentro de la nanocinta, ésto se presenta para condiciones de frontera denominadas “armchair”. En el caso de fronteras “zigzag”, el comportamiento es conductor y aparecen estados de energía superficial alrededor de energía cero [71]. Experimentalmente se ha observado que es posible aislar láminas de grafeno con bordes determinados que sean estables [72, 73] y se han podido construir junturas con bordes definidos para sistemas con dopajes *pnp* [74–76], donde se investigan los posibles efectos de las fronteras y se hacen analogías con sistemas en óptica.

Teniendo en cuenta la evidencia del efecto que sobre una lámina de grafeno tienen los diferentes

tipos de fronteras y que es posible fabricar interfases con bordes bien definidos, en este trabajo analizamos las propiedades de transporte en interfases GIS , $GG'S$ (G' : película de grafeno con diferente dopaje) y GSG para fronteras “armchair” y “zigzag”. En junturas GIS se ha analizado la conductancia diferencial para $E > 0$ pero no se ha profundizado en el efecto que las fronteras pueden tener sobre esta [60]. En nuestro trabajo consideramos los dos tipos de frontera e incidencia de huecos sobre la interfase, esto nos permite analizar la conductancia diferencial a partir de los procesos de dispersión en la interfase y de la densidad de estados del sistema, considerando diferentes dopajes y aplicando la aproximación hamiltoniana extendida a sistemas con base en grafeno.

En el caso de junturas $GG'S$ se ha analizado la conductancia diferencial cuando se considera que la región intermedia entre GS es angosta (límite corto) y muy dopada, además de considerar únicamente fronteras tipo “zigzag”. En este caso nosotros analizamos la conductancia diferencial que se encuentra a partir de una expresión general para la corriente, donde es posible modelar la película de grafeno como un pozo o barrera de potencial y que se utiliza para ambos tipos de fronteras. Lo cual nos permite encontrar estados cuasiligados de Andreev en el sistema, así como condiciones para la observación de la paradoja de Klein en sistemas superconductores.

Teniendo en cuenta que en el grafeno es posible modificar el nivel de Fermi o dopaje con ayuda de una fuente externa, se han analizado interfases GG' con dopajes $n - p$ [77, 78], que se comportan como lentes con índice de refracción negativo o lentes de Veselago que enfocan electrones de manera análoga a como lo hace una lente con los fotones en la óptica [77]. En este trabajo proponemos la creación de una lente de Veselago a partir de una juntura GSG que enfoca electrones y huecos en diferentes regiones espaciales, para esto analizamos la conductancia diferencial cruzada en este tipo de junturas con un dopaje tipo pnp . Considerando que las interfase con base en grafeno han mostrando ser sistemas apropiados para producir electrones entrelazados [79–81], exponemos la posibilidad de controlar experimentalmente el sistema para observar una fuente de electrones entrelazados.

La presentación de los resultados del trabajo se realiza de la siguiente manera: En el primer capítulo se introducen los conceptos básicos que se desarrollan a lo largo del documento, ilustramos las diferentes dispersiones que ocurren en una interfase NS y en particular como el parámetro de orden ocasiona reflexiones de $e - h$ o de Andreev locales y no locales. Para esto explicamos las ecuaciones de BdG y su extensión a los sistemas relativistas que son necesarias para el estudio de los sistemas que involucran grafeno y superconductividad. También explicamos las ecuaciones de BdG para sistemas anisotrópicos que se utilizan para el análisis de las propiedades de transporte de superconductores de alta T_c . Exponemos también como a partir de las soluciones asintóticas de las ecuaciones de BdG se pueden encontrar las funciones de Green, las cuales pueden ser usadas para analizar las propiedades de transporte en interfases que involucran superconductores no convencionales.

El segundo capítulo se centra en determinar el efecto que sobre la conductancia diferencial no local o cruzada tiene la simetría del potencial de pares en sistemas conformados por cupratos y superconductores con base en Fe . En el caso de los cupratos se utilizan las ecuaciones de BdG para describir las dispersiones de las partículas en una juntura $NISIN$ y encontrar la conductancia diferencial cruzada, mientras que en el caso de los superconductores con base en Fe se utiliza el formalismo de las funciones de Green para describir la conductancia diferencial cruzada en un sistema conformados por dos contactos normales sobre un superconductor con base en Fe .

En el tercer capítulo analizamos la conductancia diferencial de una juntura GS cuando se

consideran fronteras “armchair” y “zigzag”, para esto extendemos la aproximación hamiltoniana a sistemas con base en grafeno y encontramos una expresión general para la corriente eléctrica. Calculamos la función de Green fuera del equilibrio para el sistema GS , que se encuentra a partir de las funciones de Green de un grafeno y de un grafeno al cual se le ha inducido superconductividad, para los dos tipos de fronteras. Adicionalmente, se utilizan los resultados encontrados para estudiar las propiedades de transporte para una juntura GS dopada tipo $p - n$.

En el cuarto capítulo se analizan las propiedades de transporte de una juntura $GG'S$ para fronteras “armchair” y “zigzag”, cuando G' es considerada como un pozo o una barrera de potencial. Encontramos la densidad de estados para el sistema $GG'S$ a partir de la función de Green fuera del equilibrio, la conductancia diferencial de la expresión general para la corriente encontrada en el capítulo anterior y la ecuación de Dyson. Analizamos el efecto que sobre las propiedades de transporte tiene la película de grafeno cuando se considera como un pozo de potencial y la paradoja de Klein cuando se considera a la película como una barrera de potencial.

En el quinto capítulo proponemos la formación de una lente de Veselago a partir de una juntura GSG que permite enfocar electrones y huecos en puntos separados en el espacio, para esto analizamos las probabilidades de transmisión electrón - electrón y electrón - hueco para las junturas GS y SG encontradas a partir de las soluciones de las ecuaciones de $BdGD$ y las probabilidades de transmisión de electrón - electrón y electrón - hueco no locales, las cuales son proporcionales a la conductancia diferencial no local a partir de la función de Green fuera del equilibrio para el sistema GSG , considerando que la juntura tiene un dopaje pn . Analizamos también el efecto de múltiples reflexiones en la región superconductora y la formación de trayectorias cáusticas en el sistema.

En el sexto capítulo se exponen las conclusiones a las que se ha llegado para cada tópico así como los resultados originales encontrados. Por último en los anexos se resumen los desarrollos analíticos de los diferentes capítulos y se presenta la bibliografía utilizada para identificar la relevancia del trabajo.

ACRONIMOS

AE = Reflexión de Andreev Especular
ARPES = espectroscopia de fotoemisión con resolución de ángulo
BCS = Bardeen, Cooper y Schrieffer
BdG = Ecuaciones de Bogoliubov de Gennes
BdGD = Ecuaciones de Bogoliubov de Gennes – Dirac
BTK = Modelo desarrollado por Blonder, Tinkham y Klapwijk
CAR = Reflexión de Andreev Cruzada
EC = Cotunelamiento
 Fe = Hierro
G = Grafeno
G-L = Ginzburg y Landau
HTSC = “High temperature critical superconductor”
I = Aislante
MGS = “midgap states”
N = Metal Normal
 q_e = Cuasipartícula tipo electrón
 q_h = Cuasipartícula tipo hueco
 R_A = Reflexión de Andreev
 R_{ee} = Reflexión electrón - electrón
S = Superconductor
S' = Superconductor con base en Fe
Sm = Semiconductor
 T_c = Temperatura crítica
 v_F = Velocidad de Fermi
ZBCP = “Zero Bias Conductance Peak”

Conceptos básicos de transporte en sistemas superconductores

El estudio de las propiedades de transporte en diferentes interfases que involucran superconductividad se centra en el efecto del parámetro de orden sobre las diferentes dispersiones que se producen en la interfase, en particular la reflexión $e - h$; éstas dispersiones fueron introducidas por Andreev como una clase de soluciones de las ecuaciones de BdG , las cuales describen el comportamiento de las excitaciones elementales o cuasipartículas en el superconductor. Las reflexiones de Andreev han sido utilizadas en superconductores anisotrópicos para explicar las propiedades de transporte locales y no locales, principalmente en interfase NS [6], en sistemas con contactos normales [8, 39, 82] y junturas con base en grafeno [60].

Las propiedades de transporte también han sido estudiadas utilizando el formalismo de las funciones de Green a partir de las cuales es posible encontrar la corriente eléctrica de una juntura NS , utilizando la ecuación de Dyson y la aproximación hamiltoniana [83]. En este capítulo se presentan diferentes conceptos básicos que se desarrollarán a lo largo del trabajo para analizar las propiedades de transporte en sistemas con superconductividad.

1.1. Parámetro de Orden

En esta sección se describe uno de los elementos más importantes para comprender el estado superconductor, el parámetro de orden. Propuesto por John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer es parte de la teoría microscópica para explicar el estado superconductor conocida como teoría BCS [2]; la cual establece que la superconductividad se debe a la interacción atractiva neta entre electrones con momento y espín opuesto conocidos como pares de Cooper. La superconductividad se caracteriza por la presencia de un potencial de pares o parámetro de orden ($\Delta = |\Delta|e^{i\varphi}$), cuyo módulo al cuadrado es proporcional a la densidad de electrones apareados y su fase expresa la correlación de largo alcance en el sistema. La existencia del potencial de pares fue verificada por Giaever en 1960, quien midió la corriente eléctrica en función del voltaje aplicado para una juntura metal normal (N) - superconductor (S) realizando un experimento de “tunneling” [4].

En general el potencial de pares puede ser in - homogéneo y anisotrópico de la forma

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\langle \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}') \right\rangle, \quad (1.1)$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial de interacción neto entre electrones y conduce a la formación de pares de Cooper y $\hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r})$ es el operador de campo fermiónico que destruye un electrón con espín β , en la posición \mathbf{r} .

Para superconductores homogéneos el potencial de pares es invariante bajo traslaciones

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.2)$$

y definiendo la transformada de Fourier

$$\Delta(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{s} \Delta(\mathbf{s}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}}, \quad \mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'. \quad (1.3)$$

En este caso el potencial de pares se manifiesta como un gap de energía en el espectro de las excitaciones en el superconductor como se mostrará más adelante.

Para un superconductor isotrópico el potencial de pares es independiente del vector de onda de las cuasipartículas por lo que presenta isotropía en el espacio recíproco y puede ser escrito como

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0. \quad (1.4)$$

En los superconductores de alta temperatura crítica el potencial de pares depende del vector de onda y su valor cambia para diferentes puntos sobre la superficie de Fermi, ésto da lugar a anisotropías en el espectro de las cuasipartículas y $\Delta(\mathbf{k})$ puede escribirse encontrando la transformada de Fourier de (1.1) como

$$\Delta(\mathbf{k}) = \int \Delta(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \langle c_{-\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'} \rangle, \quad (1.5)$$

donde $c_{\mathbf{k}'}$ es el operador de destrucción en el estado \mathbf{k}' y $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ representa la transformada de Fourier del potencial de interacción $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ y que es escrito de la forma

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} V(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.6)$$

con V una constante positiva proporcional al volumen de normalización de la muestra. Realizando una expansión de $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ en armónicos esféricos este puede ser escrito como

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l V_l(k, k') Y_l^m(\Theta_k, \varphi_k) Y_l^{m*}(\Theta'_k, \varphi'_k), \quad (1.7)$$

utilizando el anterior resultado (1.7) es posible escribir $\Delta(\mathbf{k})$ como

$$\Delta(\mathbf{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \Delta_l^m(\mathbf{k}) Y_l^m(\Theta_k, \varphi_k), \quad (1.8)$$

con

$$\Delta_l^m(\mathbf{k}) = 4\pi V_l(k, k') Y_l^{m*}(\Theta_k, \varphi_k) u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}^* \left\langle \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}) \right\rangle. \quad (1.9)$$

Teniendo en cuenta que los estados relevantes en la interacción efectiva entre electrones se encuentran cerca a la superficie de Fermi ($k = k_F$), es posible realizar la siguiente aproximación para el potencial de interacción efectivo

$$V_l(k, k') \cong V_l(k_F, k_F) = V_l, \quad (1.10)$$

según la anterior aproximación, el potencial de pares puede ser escrito como

$$\Delta(\mathbf{k}) \cong \Delta(\mathbf{k}_F) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l V_l C_l^m Y_l^m(\Theta_k, \varphi_k), \quad (1.11)$$

con

$$C_l^m = 4\pi Y_l^{m*}(\Theta'_k, \varphi'_k) \left\langle \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}) \right\rangle. \quad (1.12)$$

Utilizando la ecuación (1.11), es posible observar las diferentes simetrías del parámetro de orden. Considerando $l = 0$ la simetría que se encuentra es tipo s , para $l = 2$ la simetría resultante es tipo d , las gráficas polares de estas simetrías se muestran en las figuras 1.1, 1.2 y 1.3.

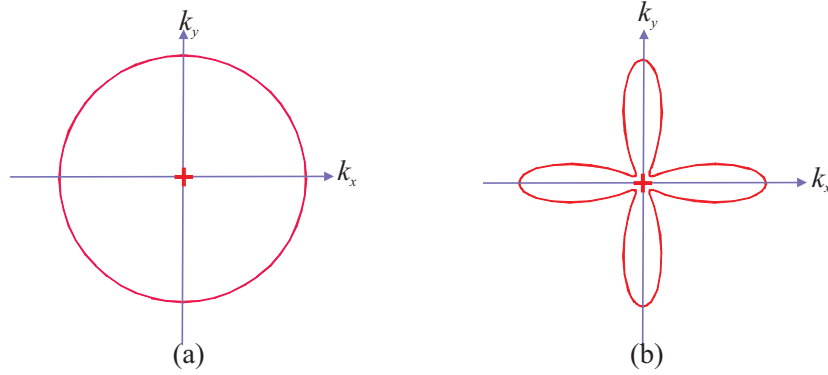


Fig. 1.1. Simetrías del potencial de pares en el espacio recíproco, a) Simetría s , $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0$, b) Simetría s anisotrópica, $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 + \Delta_1 \cos^4 2\theta$.

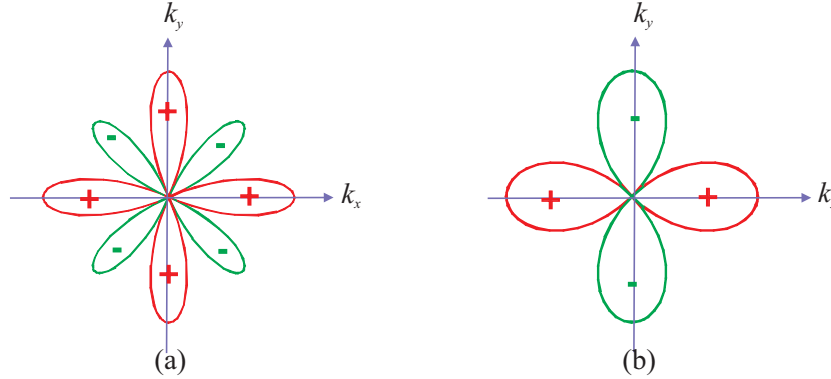


Fig. 1.2. Simetrías del potencial de pares en el espacio recíproco, a) Simetría s extendida $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 + \Delta_1 \cos 4\theta$, b) Simetría $d_{x^2-y^2}$, $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 \cos 2\theta$.

En simetrías tipo s la fase del potencial de pares φ no cambia, mientras que en las simetrías d y s extendida la fase cambia.

Una característica fundamental, que es tema de estudio actual acerca de los cupratos, es el mecanismo de apareamiento de los electrones, siendo los más probables un mecanismo electrón – fonón [9] o por medio de fluctuaciones de espín [10], por esta razón es fundamental el estudio de la simetría del potencial de pares ya que ésta representa un punto de partida para entender el

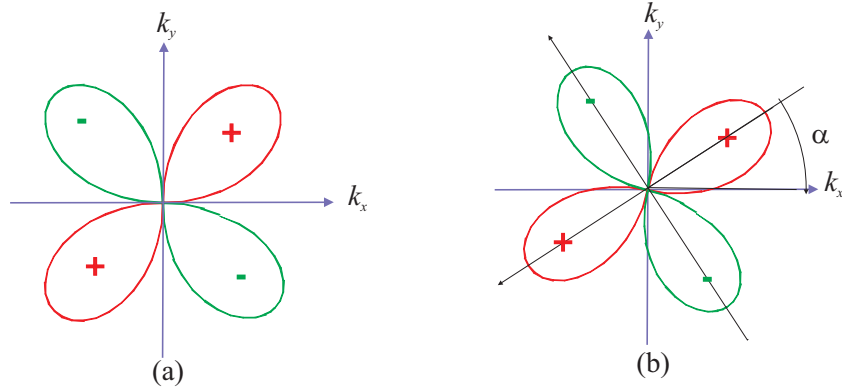


Fig. 1.3. Simetrías del potencial de pares en el espacio recíproco, a) Simetría d_{x-y} , $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 \sin 2\theta$, b) Simetría general d_α , $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0 \cos 2(\theta - \alpha)$.

mecanismo de interacción entre los electrones responsable de la superconductividad. En general la simetría de diferentes compuestos superconductores no se conoce con certeza, así como si es pura o compuesta [84]. En el caso de los cupratos el estado de apareamiento de espín es singlete [85], por lo cual las posibles simetrías para el parámetro de orden son s , d , g , ó mezclas de estas como $d + is$, $g + id$, etc. Las simetrías tipo s se caracterizan por no tener un cambio de fase relativo, mientras que las simetrías tipo d o g presentan un cambio de fase de π . En simetrías mezcladas como $d + is$, la fase cambia continuamente y los estados rompen la simetría de inversión temporal [7, 8].

Con relación a la anisotropía en el módulo y en la fase del potencial de pares se han realizado diferentes análisis de las propiedades de transporte en los cupratos; por ejemplo, en experimentos de tunelamiento en interfases *NIS* [19–25], la conductancia diferencial depende de la orientación de la interfase y para una orientación (110) la conductancia es máxima a voltaje cero presentando un pico denominado en inglés “Zero Bias Conductance Peak-ZBCP”. La existencia del ZBCP es atribuida a la aparición de estados de energía cero (“Zero Energy States-ZES”) que se forman en la interfase *SIS* [26, 28, 86]; éstos estados de energía se originan por reflexiones de Andreev que involucran el cambio de signo ó de fase del potencial de pares en la interfase. Los estados de energía cero, también llamados “midgap states” (MGS) se pueden formar en interfases *INS*, *SIS* [28, 29] y juegan un papel relevante en el efecto Josephson en junturas *SIS* [30–32, 34, 39]. Una revisión de efectos de tunelamiento y de estados superficiales en superconductores de alta temperatura crítica se puede consultar en [6, 38, 39].

Para determinar la simetría del potencial de pares es necesario conocer su módulo y fase, en este sentido se han realizado experimentos de espectroscopía de fotoemisión con resolución de ángulo (ARPES), medidas de longitud de penetración, etc., los cuales dan información acerca de la magnitud del potencial de pares (ver por ejemplo para cupratos [87, 88], y para multibandas [19, 89]), mientras experimentos basados en el efecto Josephson (como son los de interferometría en cupratos [90] y en multibandas [91]) y magnetometría en tricristales [7, 92–94], etc., proveen información sobre la fase del parámetro de orden y son de gran importancia para diferenciar entre superconductores tipo s o tipo d . Para una revisión de estos y otros experimentos ver [95–97].

El estudio de la simetría del potencial de pares puede realizarse por medio del análisis del efecto Tomasch [98], este efecto ocurre cuando se aplica un voltaje que hace fluir corriente eléctrica

perpendicular a las interfaces en estructuras NSN , $NISN$ y $NSIN$, en las que aparecen oscilaciones en la conductancia diferencial y en la densidad de estados. El efecto Tomasch ha sido medido y explicado mediante las reflexiones de Andreev [99], [100] en superconductores isotrópicos. En la literatura se han realizado estudios teóricos del efecto Tomasch para sistemas $NISN$ considerando la anisotropía del superconductor [82, 101], y se han realizado experimentos del efecto Tomasch en superconductores de alta temperatura crítica [102].

1.1.1. Superconductores con base en Hierro

En la actualidad el estudio de la simetría del potencial de pares se ha extendido a los superconductores de alta temperatura crítica con base en Fe [11], que han atraído gran atención por que presentan una estructura de multibandas y una superficie de Fermi cilíndrica lo cual revela la naturaleza cuasi – bidimensional del sistema, ver fig 1.4; además, éstos son los primeros HTc que no están basados en óxidos de Cu que se han encontrado hasta el momento.

En los superconductores con base en Fe , se observa que la superficie de Fermi presenta dos brechas superconductoras, ver fig. 1.4, una mayor que la otra relacionada con el cilindro central y con las de los extremos de la superficie de Fermi y otra menor relacionada con el segundo cilindro concéntrico, cada una de las brechas es prácticamente isotrópica en su respectivo cilindro.

La simetría del parámetro de orden se ha determinado a través de experimentos de detección de modos de resonancia de neutrones [12–14] y dispersiones de cuasipartículas en espectroscopía “Tunneling” [15, 16], como tipo s . Algunos estudios muestran que la simetría puede ser s_{+-} [103], ya que la simetría de los parámetros de orden de cada gap es s pero hay una diferencia de fase de π entre los dos parámetros de orden. La determinación de la simetría de estos compuestos es un tema abierto actualmente [104].

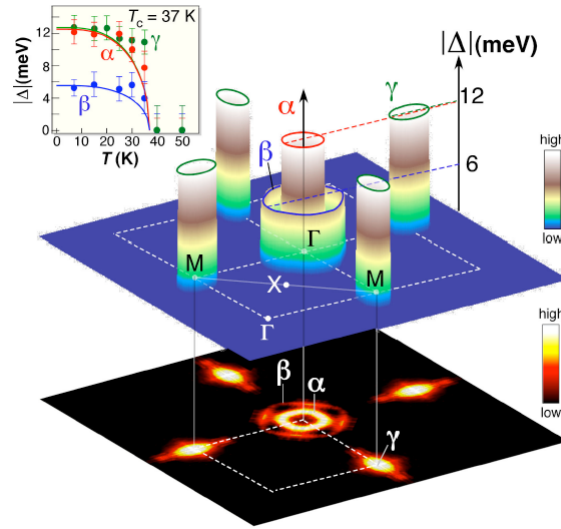


Fig. 1.4. Esquema tridimensional del gap superconductor en $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$ utilizando ARPES [19]. Vista inferior superficie de Fermi, inserto dependencia de los gaps con la temperatura.

Con relación a las propiedades de transporte en estos nuevos superconductores se han realizado estudios teóricos de transmisión a través de la interfase en sistemas NS' (S' : superconductor con base en Fe) [24] y $NS'S$ [36]. El comportamiento de la conductancia diferencial en estos

sistemas se explica a través de reflexiones de Andreev [37] que se explicarán más adelante, además se encuentra que la conductancia diferencial depende fuertemente de la simetría del potencial de pares.

1.2. Reflexiones de Andreev

Cuando se consideran interfases entre un metal normal y un superconductor el potencial de pares puede verse como una barrera de potencial, de tal manera que un electrón que incide desde el metal normal hacia el superconductor puede reflejarse como un electrón o como un hueco, induciendo un par de Cooper en la región superconductora, ver fig. 1.5 a. En el metal normal el hueco es reflejado con una velocidad de grupo opuesta a la velocidad del electrón incidente, por lo cual se denomina una retroreflexión. ver fig. 1.5 b.

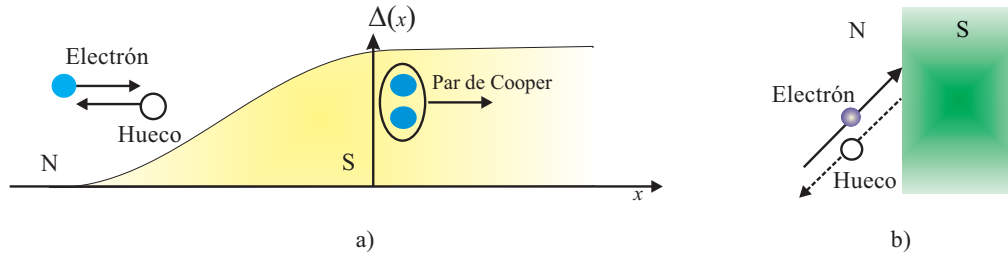


Fig. 1.5. Reflexión de Andreev en una interfase NS para energía $E < \Delta(\mathbf{k}, \infty)$, a) un electrón incidente es reflejado como un hueco y un par de Cooper es transmitido en la región superconductora. b) el hueco se refleja con velocidad de grupo opuesta a la del electrón incidente.

Las dispersiones electrón - hueco fueron introducidas por Andreev en 1964 (reflexiones de Andreev R_A) y son responsables del comportamiento de la conductividad térmica y la termodinámica del estado intermedio [105, 106], han sido utilizadas en superconductores de baja temperatura crítica para estudiar el efecto Josephson en junturas SNS [107], para explicar propiedades de transporte en superconductores de alta temperatura crítica, [108, 109] entre otros. En la actualidad las reflexiones de Andreev se utilizan para estudiar junturas bipolares, puntos cuánticos y el efecto Josephson en sistemas superconductores conformados por estructuras de grafeno [66, 110]. Para una revisión acerca de las reflexiones de Andreev ver la referencia [6]. La existencia de reflexiones de Andreev en junturas SNS da lugar a la formación de los niveles de Andreev [111], los cuales se originan debido a la interferencia de cuasipartículas que son dispersadas en las interfases NS y SN , éstos niveles de energía aparecen también en junturas que involucran superconductores anisotrópicos [8, 39, 82]. Cuando los superconductores poseen simetría d , los niveles de Andreev presentan estados con energía cero (ZES), los cuales ocasionan picos en la conductancia diferencial a voltaje cero y son importantes para el estudio de superconductores de alta temperatura crítica [38].

1.2.1. Reflexiones de Andreev Cruzadas

Consideremos ahora un sistema con dos terminales en el estado normal como se ve en la fig. 1.6. Si un electrón incide desde el terminal A hacia el superconductor puede ser reflejado como un hueco en el terminal B , éste proceso se denomina reflexión de Andreev no local o cruzada (“CAR – crossed Andreev reflection”) ver fig. 1.6 b y 1.6 d. Las CAR son posibles si el electrón

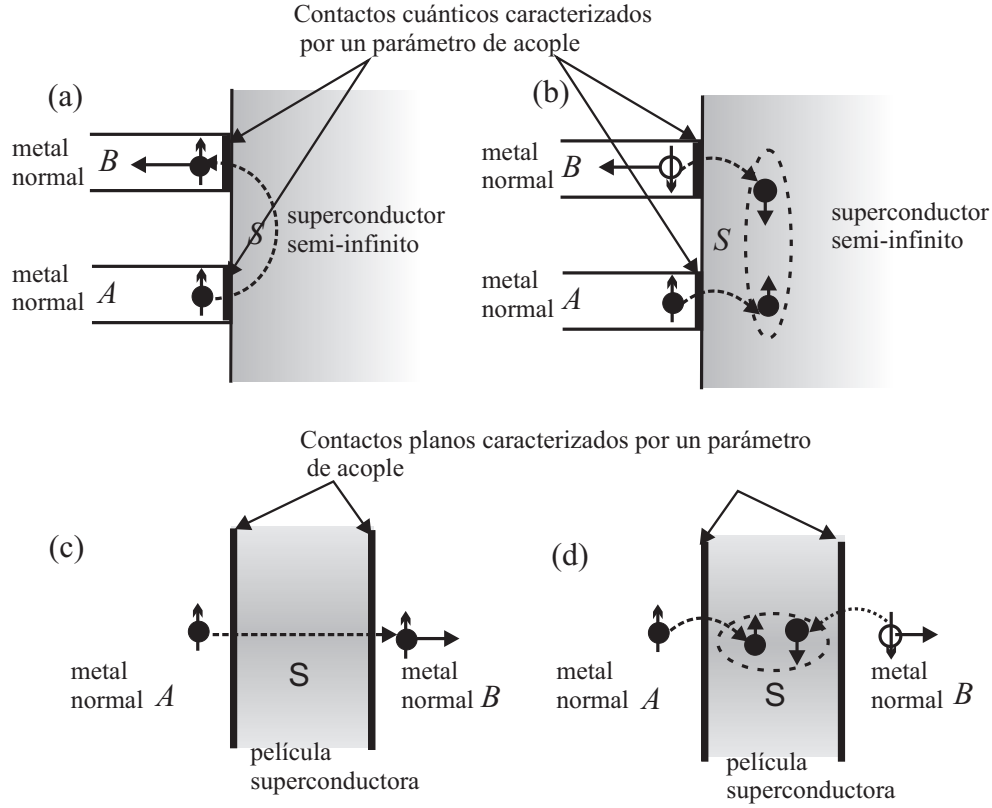


Fig. 1.6. Procesos de dispersión en sistemas de dos terminales. a) Cotunelamiento y b) reflexión de Andreev cruzada en un superconductor semi-infinito acoplados con dos contactos cuánticos normales. c) Cotunelamiento y d) reflexión de Andreev cruzada en una película superconductora acoplada en cada lado a un metal en el estado normal.

que incide con espín hacia arriba puede asociarse con otro electrón con espín hacia abajo proveniente del terminal A y formar un par de Cooper en la región superconductora, por lo tanto, es de esperarse que éste proceso sea probable si la separación entre los contactos es del orden de la longitud de coherencia. Las CAR compiten con otro proceso en el que el electrón incidente con espín arriba es transmitido dos veces a través de las interfases y es transferido como un electrón con espín arriba en el terminal B (“elastic cotunneling – EC”), ver fig 1.6 a y 1.6 c.

Debido a que las CAR y el EC contribuyen con signo opuesto a la corriente eléctrica en el terminal B , la conductancia diferencial no local (la derivada de la corriente en el terminal B respecto al voltaje en el terminal A) puede exhibir un cambio de signo al variar el voltaje. En el caso de superconductores débilmente acoplados a brazos metálicos normales, la probabilidad de que se produzcan CAR y EC es del mismo orden y tienden a cancelar la corriente eléctrica en el terminal B [49]. En principio, esta cancelación puede ser eliminada si usamos terminales magnéticos que puedan favorecer uno de los procesos; por ejemplo, si el terminal A tiene magnetización positiva y el terminal B magnetización negativa, es más probable que

un electrón proveniente del terminal A forme un par de Cooper y se transmita como un hueco en el terminal B [112]. Experimentalmente ha sido posible observar las reflexiones de Andreev no locales, en un primer acercamiento utilizando sistemas más parecidos a junturas planas [48, 51], donde se han usado contactos ferromagnéticos [44], más recientemente se han utilizado sistemas conformados por puntos cuánticos sobre nanotubos de carbono [52] o nanoalambres [53] en los cuales se ha identificado el efecto de las dispersiones no locales como los cambios en la conductancia diferencial.

En junturas planas de doble barrera aislante ocurren CAR , las cuales pueden dominar el transporte, estas han llamado la atención en los últimos años debido a su posibilidad de usarlas como una fuente de electrones entrelazados (“entangled electron pairs”) [40–48, 79, 113, 114]. Recientemente se han realizado estudios de las CAR en cupratos para sistemas con dos contactos puntuales y considerando simetría d del parámetro de orden [49].

1.2.2. Reflexiones de Andreev en Grafeno

En los últimos años a surgido un gran interés por estudiar el grafeno [54], nombre que recibe una mono - capa de carbono con estructura cristalina hexagonal, esta estructura esta conformada por dos subredes triangulares A y B superpuestas ver fig. 1.7 a. La red recíproca del grafeno también es hexagonal y la primera zona de Brillouin esta compuesta de seis vertices de los cuales solo dos son no equivalentes \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- ver fig. 1.7 b.

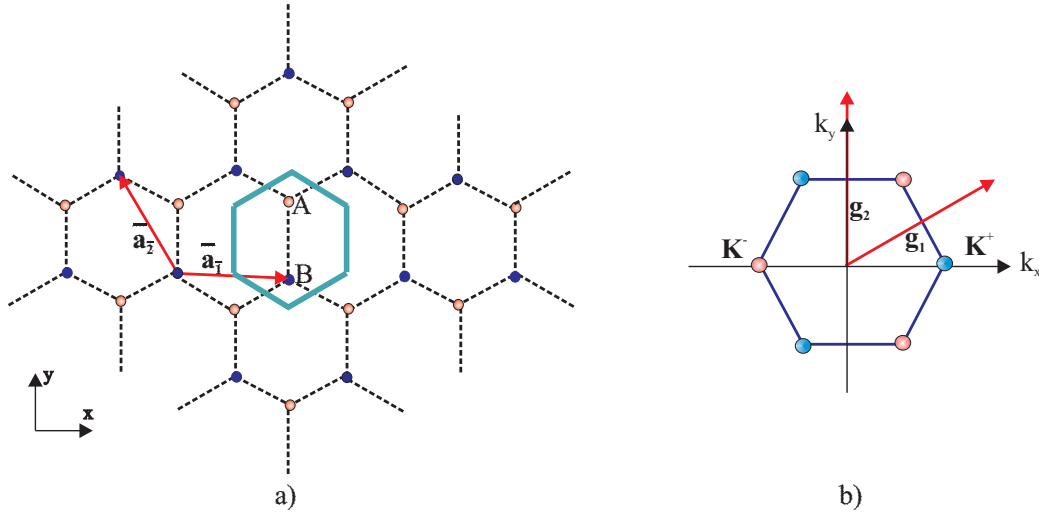


Fig. 1.7. a) Estructura del grafeno en el espacio real, la celda en color azul corresponde a la celda primitiva que contiene un átomo de cada subred generada a partir de los vectores $\mathbf{a}_1 \equiv a(1, 0)$ y $\mathbf{a}_2 \equiv \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3})$, donde $a = \sqrt{3}a_0$ y $a_0 \equiv 0,142nm$ la distancia entre átomos de carbono. b) Primera Zona de Brillouin y vectores $\mathbf{g}_1 \equiv \frac{\sqrt{2}\pi}{a_0}\left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$ y $\mathbf{g}_2 \equiv \frac{\sqrt{2}\pi}{a_0}\left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right)$ de la red recíproca. La diferencia de los colores de los vertices \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- indica que cada uno es generado por un conjunto diferente de vectores de la red recíproca. La distancia de separación entre vertices de la primera zona de Brillouin a primeros vecinos es de $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a_0} \equiv 25,546nm^{-1}$.

La ubicación de los vertices está dada por $\mathbf{K}^+ = (K_D, 0) \equiv \left(\frac{4\pi}{3a}, 0\right)$ y $\mathbf{K}^- = (-K_D, 0) \equiv \left(-\frac{4\pi}{3a}, 0\right)$, puntos que se denominan *Puntos de Dirac* por la forma que el espectro de energía toma justo en la cercanía de éstos.

El espectro de energía puede ser calculado usando un modelo TB (*Tight-binding*) [56, 57, 115, 116] para el grafeno, teniendo en cuenta únicamente interacciones entre átomos a primeros vecinos como

$$E^{\pm}(k_x, k_y) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_x a_0) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a_0\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_y a_0\right)}, \quad (1.13)$$

donde el signo \pm hace referencia a la banda de conducción y a la banda de valencia respectivamente, y $t \approx 2.8\text{eV}$ es el parámetro de acople a primeros vecinos (i.e., “*hopping*”). La relación de dispersión (1.13) se puede observar en la fig. 1.8, en donde se ilustra que la banda de conducción y la banda de valencia se tocan en los *Puntos de Dirac* y que el comportamiento del espectro cerca a estos puntos es lineal, el cual se asemeja al comportamiento de los portadores de carga llamados *Fermiones de Dirac* (i.e., partículas con masa efectiva nula). La dependencia lineal ha sido corroborada experimentalmente [117, 118] y había sido predicha teóricamente por Wallace en 1947 [56], lo que ha traído un gran interés a la comunidad científica, debido a la posibilidad de establecer un análogo relativista en sistemas de materia condensada con la ecuación de Dirac [57].

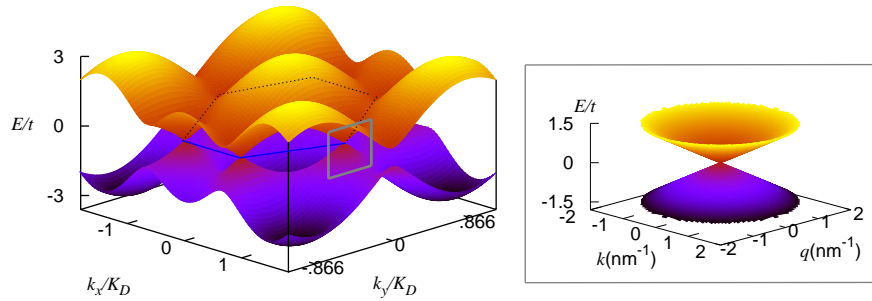


Fig. 1.8. Estructura de bandas del grafeno, ilustrando los seis puntos en los cuales las bandas de valencia y de conducción se interceptan; en cercanías de estos puntos la estructura de bandas puede ser aproximada como conos, como se ve en el recuadro.

El grafeno no es superconductor pero se le puede inducir superconductividad al ponerse en contacto con un material superconductor, debido al efecto de proximidad [58, 59]. Uno de los sistemas que ha cobrado interés es la formación de junturas grafeno – superconductor, ya que se ha mostrado experimentalmente que es posible observar el efecto Josephson en junturas *SGS* [70], donde el efecto de coherencia entre las dos regiones superconductoras es establecido por el transporte eléctrico a través del grafeno. La implementación del grafeno en junturas con superconductores ha abierto un campo reciente de investigación teórico y experimental en interfases [60–64].

Las reflexiones de Andreev estudiadas antes de la aparición del grafeno mostraban que el electrón y el hueco reflejado por la interfase pertenecen a la misma banda de energía, de tal manera que el hueco reflejado tiene una velocidad de grupo en la dirección opuesta al electrón incidente, estas reflexiones son conocidas también como reflexiones intrabanda, ver fig. 1.9 a. En una interfase *GS*, puede ocurrir una reflexión de Andreev en la que un electrón con energía menor al potencial de pares que incide desde la región normal se encuentre en la banda de conducción y el hueco reflejado esté localizado en la banda de valencia, el cual posee una

velocidad de grupo que es paralela a su momentum. La anterior reflexión es diferente a la reflexión de Andreev normal estudiada anteriormente, ya que el hueco y el electrón pertenecen a bandas diferentes, ocasionando que el hueco se refleje de forma especular (una reflexión de Andreev especular – AE) que se conoce como reflexión interbanda, ver fig 1.9 b; éstas reflexiones fueron propuestas por Beenakker en el caso de interfaces *GS* [60] y se han empleado para estudiar otros tipos de junturas [119, 120], donde la presencia de este nuevo tipo de reflexiones de Andreev afecta las propiedades de transporte.

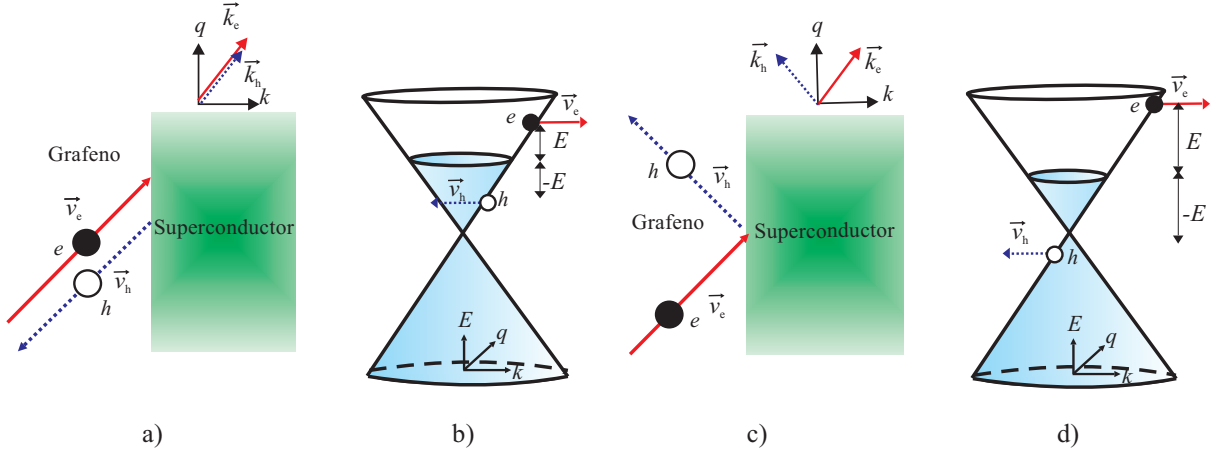


Fig. 1.9. Procesos de dispersión interfase metal normal superconductor: a) Retroreflexión de Andreev, b) esquema de la reflexión intrabanda, en este caso el electrón incidente y el hueco reflejado pertenecen a la misma banda de energía; c) Reflexión de Andreev especular, d) esquema de la reflexión interbanda, el electrón incidente y el hueco reflejado pertenecen a distintas bandas de energía. Las flechas indican la dirección de la velocidad y las líneas sólidas y punteadas distinguen entre un electrón y un hueco respectivamente.

1.3. Propiedades de Transporte

Cuando se hace fluir corriente eléctrica perpendicular a una interfase *NS* es posible encontrar la dependencia de la corriente eléctrica neta transportada por las cuasipartículas en función del voltaje aplicado, para ello utilizamos el modelo desarrollado por Blonder, Tinkham y Klapwijk, conocido como modelo BTK [121] como

$$I_S = 2N(0)ev_F A \int_{-\infty}^{\infty} [f_0(E - eV) - f_0(E)] [1 + R_{e-h}(E) - R_{e-e}(E)] dE, \quad (1.14)$$

donde f_0 es la función de distribución de Fermi - Dirac $f_n = f_n(E)$ para partículas con energías $E_n \geq 0$ con $n = 0$ medida respecto al potencial químico μ , v_F es la velocidad de Fermi, $N(0)$ es la densidad de estados en el estado normal calculada en la superficie de Fermi y A el área de la sección transversal del superconductor. La corriente eléctrica es proporcional al factor $1 + R_{e-h} - R_{e-e}$, donde se observa que en una reflexión normal (descrita por R_{e-e}) reduce la corriente, mientras que en una reflexión de Andreev (descrita por R_{e-h}) la incrementa, esto debido a que en estas últimas se induce un par de Cooper en el superconductor.

El modelo BTK se conoce como aproximación de dispersión (“the scattering approach”) ya que se basa en los procesos de dispersión que experimenta una partícula al incidir sobre una interfase, en este caso se utilizan las ecuaciones de Bogoliubov – de Gennes *BdG* para describir las cuasipartículas y encontrar los coeficientes de reflexión. Otro método usado en la literatura para el estudio de las propiedades de transporte es el de las funciones de Green de no equilibrio [122–124], éstos métodos serán descritos a continuación en las secciones 1.3.1 y 1.3.2 respectivamente.

1.3.1. Ecuaciones de Bogoliubov de Gennes

Las ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes (*BdG*) [3], describen el comportamiento de las excitaciones elementales o cuasipartículas en un superconductor; éstas ecuaciones fueron inicialmente propuestas por Bogoliubov y desarrolladas posteriormente por de Gennes, en ellas se encuentran elementos de la teoría de Bardeen, Cooper y Schrieffer [2] que se generalizan a superconductores inhomogéneos. Para encontrar estas ecuaciones consideramos un hamiltoniano que describe un sistema de electrones que interactúan como

$$H = H_0 + H_1, \quad (1.15)$$

con

$$H_0 = \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) H_e(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}), \quad (1.16)$$

$$H_1 = \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}'), \quad (1.17)$$

$$H_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + U_0(\mathbf{r}) - \mu, \quad (1.18)$$

donde $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ es el potencial vectorial debido a la presencia de campos magnéticos, $U_0(\mathbf{r})$ describe cualquier potencial escalar presente en el sistema, en él pueden estar incluidos efectos de la red de iones, fronteras, impurezas, etc., μ es el potencial químico, $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ representa la atracción efectiva entre electrones y $\hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r})$ es el operador de campo fermiónico que destruye un electrón con espín α , en la posición \mathbf{r} .

A partir del hamiltoniano del sistema es posible escribir la ecuación de movimiento del operador de campo en la imagen de Heisenberg, el cual se linealiza utilizando la aproximación de campo medio y las transformaciones de Bogoliubov como se ilustra detalladamente en el trabajo [125], con esto se encuentran las ecuaciones de *BdG* generalizadas para superconductores anisotrópicos, que independientes del tiempo pueden escribirse de la forma

$$\begin{aligned} Eu(\mathbf{r}) &= H_e(\mathbf{r})u(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')v(\mathbf{r}'), \\ Ev(\mathbf{r}) &= -H_e^*(\mathbf{r})v(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}')u(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (1.19)$$

donde $u(\mathbf{r})$ es la componente electrónica de la cuasipartícula y $v(\mathbf{r})$ la componente de hueco, de tal manera que la función de onda de las cuasipartículas se puede escribir como

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

cuando $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ las ecuaciones (1.19) describen un electrón y hueco independientes, este potencial de acople llamado potencial de pares está dado por

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum [u_n(\mathbf{r}') v_n^*(\mathbf{r}) (1 - f_n) - v_n^*(\mathbf{r}') u_n(\mathbf{r}) f_n], \quad (1.21)$$

donde la suma se realiza sobre todos los números cuánticos y $V(\mathbf{r})$ es el potencial de interacción neto entre electrones.

Superconductores homogéneos

En este caso cuando no hay potenciales externos, las ecuaciones de *BdG* son escritas de la forma

$$\begin{aligned} Eu(\mathbf{r}) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu\right)u(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')v(\mathbf{r}'), \\ Ev(\mathbf{r}) &= -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu\right)v(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}')u(\mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (1.22)$$

Debido a la simetría de traslación espacial de las ecuaciones de *BdG*, las soluciones para las ecuaciones (1.22) son funciones propias del operador momentum, por lo que pueden ser escritas de la forma

$$\begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

donde u y v son constantes por determinar y \mathbf{k} representa el vector de onda de las cuasipartículas, reemplazando (1.23) en (1.22) se obtiene un sistema homogéneo para u y v , para que dicho sistema tenga una solución no trivial el determinante debe ser igual a cero

$$\begin{vmatrix} \epsilon(\mathbf{k}) - E & \Delta(\mathbf{k}) \\ \Delta^*(\mathbf{k}) & -\epsilon(\mathbf{k}) - E \end{vmatrix} = 0, \quad (1.24)$$

con $\Delta(\mathbf{k})$ descrito según (1.3). De (1.24) se obtiene

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon^2(\mathbf{k}) + |\Delta^2(\mathbf{k})|}. \quad (1.25)$$

En este caso el potencial de pares se manifiesta como un gap de energía en el espectro de las excitaciones $E(\mathbf{k})$ con respecto al espectro de los electrones en el estado normal $\epsilon(\mathbf{k})$. El espectro de energía puede ser medido utilizando medidas de fotoemisión con resolución de ángulo ARPES, que muestran el comportamiento del espectro cerca al nivel de Fermi como se ve en la fig. 1.10.

Superconductores inhomogéneos

En este tipo de superconductores la dependencia de $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ no puede reducirse a través de la diferencia $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$; en este caso se debe buscar otra forma de abordar el problema y para esto se

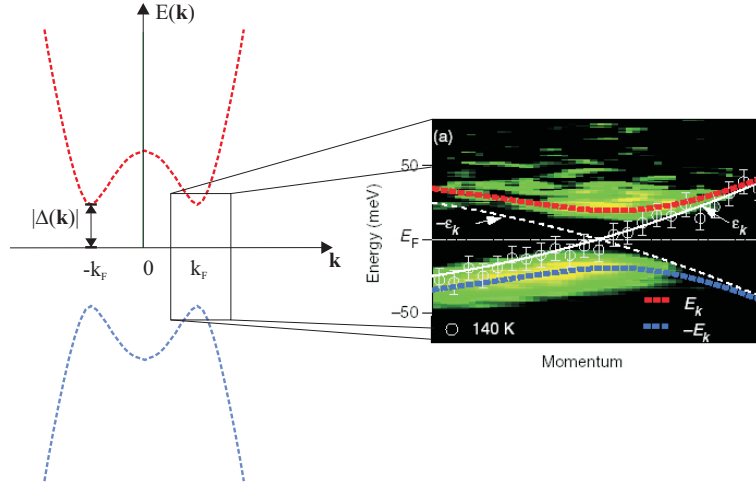


Fig. 1.10. Espectro de energía del superconductor, donde se muestra la medición experimental con ARPES del espectro para un superconductor basado en Bi. Los círculos corresponden a el espectro de energía en el estado normal $\epsilon(\mathbf{k})$ [126].

utilizan los planteamientos usados en [127] para superconductores isotrópicos y en [128] para superconductores anisotrópicos.

Para solucionar las ecuaciones (1.19) se supone un solución de la forma

$$\varphi_k(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} u_k(\mathbf{r}) \\ v_k(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

Considerando que no existen campos magnéticos presentes y despreciando el efecto de campos escalares, las ecuaciones para $u(\mathbf{r})$ y $v(\mathbf{r})$ pueden ser escritas como sigue

$$\begin{aligned} Eu(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla + k_F^2 - k^2)u(\mathbf{r}) + \int \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')v(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}d\mathbf{r}' \\ Ev(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla + k_F^2 - k^2)v(\mathbf{r}) + \int \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}')u(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (1.27)$$

realizando los siguientes cambios de variables $\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ y $\mathbf{R} = (\mathbf{r} + \mathbf{r}')/2$, la integral en las ecuaciones (1.27) puede ser escrita como

$$\int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')u(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} = \int d\mathbf{s} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R})u(\mathbf{r}-\mathbf{s})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} = \int d\mathbf{s} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{r}-\mathbf{s}/2)u(\mathbf{r}-\mathbf{s})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}}. \quad (1.28)$$

Realizando una expansión alrededor de \mathbf{r} de $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}-\mathbf{s}/2)u(\mathbf{r}-\mathbf{s})$ se obtiene

$$\int d\mathbf{s} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{r}-\mathbf{s}/2)u(\mathbf{r}-\mathbf{s})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}} = \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r})u(\mathbf{r}) + \left[-\frac{\partial u(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} - \frac{u(\mathbf{r})}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right] i \frac{\partial \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{k}} + \dots \quad (1.29)$$

con

$$\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{s} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R})u(\mathbf{r}-\mathbf{s})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{s}}. \quad (1.30)$$

Teniendo en cuenta que el segundo término de la suma (1.29), es del orden de la longitud de coherencia ξ_0 y del número de onda k_F , como $(k_F \xi_0)^{-1} \sim \Delta/E_F$ ¹, es posible escribir la aproximación

$$\int ds \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{r} - \mathbf{s}/2) u(\mathbf{r} - \mathbf{s}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}} \cong \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u(\mathbf{r}), \quad (1.31)$$

por lo que las ecuaciones (1.27) pueden ser escritas como

$$\begin{aligned} Eu(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla + k_F^2 - k^2) u(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r}) v(\mathbf{r}), \\ Ev(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla + k_F^2 - k^2) v(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) u(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.32)$$

Dado que el potencial de pares $\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ puede ser escrito para valores de k alrededor de k_F , su dependencia con \mathbf{k} puede ser reemplazada en las ecuaciones (1.32) por la dirección de dicho vector tal que

$$\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rightarrow \Delta(\mathbf{k}/k_F, \mathbf{r}) \rightarrow \Delta(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}).$$

A partir de las anteriores consideraciones se pueden reescribir las ecuaciones (1.32) como

$$\begin{aligned} Eu(\mathbf{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla) u(\mathbf{r}) + \Delta(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) v(\mathbf{r}), \\ Ev(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla) v(\mathbf{r}) + \Delta^*(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r}) u(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.33)$$

En este caso se cuenta con un grupo de ecuaciones de *BdG* que se puede resolver para superconductores anisotrópicos e inhomogéneos, en las cuales el potencial de pares $\Delta(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{r})$ depende de la posición y de la dirección del vector de onda de las cuasipartículas. Las ecuaciones de *BdG* fueron deducidas para superconductores de baja temperatura crítica, pero se han usado exitosamente para superconductores de alta temperatura crítica, como es el caso de numerosos trabajos [6, 8, 26, 28, 29, 33, 38, 86, 111, 129]. En el siguiente capítulo se utilizarán las ecuaciones de *BdG* como base para el estudio de las reflexiones y transmisiones de cuasipartículas en un sistema de doble barrera aislante.

Ecuaciones de Bogoliubov de Gennes – Dirac

Como mencionamos anteriormente, en el grafeno los electrones tiene una relación de dispersión lineal alrededor de los puntos \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- de la red recíproca. Se ha demostrado [130] y [71] que en una interacción a primeros vecinos la función de onda para los electrones puede escribirse de la forma

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}^+ \cdot \mathbf{r}} \psi_+(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{K}^- \cdot \mathbf{r}} \psi_-(\mathbf{r}), \quad (1.34)$$

donde las funciones $\psi_+(\mathbf{r})$ y $\psi_-(\mathbf{r})$ cumplen una ecuación relativista equivalente a la ecuación de Dirac alrededor del valle \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- respectivamente dadas por

$$\begin{aligned} H_+ \psi_+(\mathbf{r}) &= E \psi_+(\mathbf{r}), \\ H_- \psi_-(\mathbf{r}) &= E \psi_-(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.35)$$

¹En los superconductores de alta temperatura crítica razón $\Delta/E_F \sim 10^{-1} - 10^{-2}$.

con H_{\pm} el hamiltoniano centrado en el valle \mathbf{K}^+ o \mathbf{K}^- , el cual puede ser escrito como

$$H_{\pm} = -i\hbar v_F(\pm\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y) + U, \quad (1.36)$$

donde $\sigma_{x(y)}$ representan las matrices de Pauli, U representa un potencial externo y v_F es la velocidad de Fermi que es el equivalente a la velocidad de la Luz en la ecuación de Dirac ($v_F = \frac{3a_0t}{2} 1 \times 10^6 \text{m/s}$). La relación de dispersión para los puntos de Dirac \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- [60, 110, 131] es

$$E \approx \hbar v_F |\delta \mathbf{k}| = \hbar v_F \sqrt{k^2 + q^2}, \quad (1.37)$$

donde k y q representan los vectores de onda en dirección x y y respectivamente, cercanos a los puntos de Dirac. Las funciones de onda que son descritas como espinores compuestos por estados que pertenecen a las subredes A y B están dadas por

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{\pm,A}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\pm,B}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (1.38)$$

en (1.38) se ilustra que los grados de libertad asociados a las subredes A y B , son equivalentes al espín de la ecuación de Dirac y por lo tanto se suele denominar *pseudospín*.

Para el caso en el que tengamos junturas grafeno - superconductor o en el que se considere al grafeno como superconductor a través del efecto de proximidad [132, 133], las cuasipartículas se pueden describir por medio de las ecuaciones de Bogoliubov de Gennes – Dirac [134], las cuales son una extensión de las ecuaciones de Bogoliubov de Gennes y pueden ser escritas como dos conjuntos de ecuaciones desacopladas para el grafeno [60] de la forma

$$\begin{pmatrix} H_{\pm} - E_F & \Delta \\ \Delta^* & -H_{\pm} + E_F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (1.39)$$

Teniendo en cuenta la degeneración presente en los valles de la estructura de bandas, podemos escoger cualquier conjunto de soluciones para las ecuaciones de $BdGD$, por ejemplo para H_+ , la cuasipartícula descrita por el espinor de cuatro componentes (u, v) , está compuesta de un componente electrónico $u = (\psi_{+,A}(\mathbf{r}), \psi_{+,B}(\mathbf{r}))$ y un componente de hueco $v = \hat{T}u$, con \hat{T} el operador de inversión temporal. El parámetro de orden superconductor inducido en el grafeno acopla electrones con huecos que pertenecen a diferentes valles de la estructura de bandas.

1.3.2. Funciones de Green para las ecuaciones de BdG

Dado que las funciones de Green representan los propagadores de las cuasipartículas en un superconductor, éstas pueden ser calculadas a partir de las soluciones de las ecuaciones de BdG o $BdGD$ según el caso. Para ello definimos los operadores de campo espinorial en el espacio de Nambu como

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} \Phi_{\uparrow}(\mathbf{r}, t) \\ \Phi_{\downarrow}(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} = \sum_n [\varphi_n(\mathbf{r}, t) \gamma_{n\uparrow} + \varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r}, t) \gamma_{n\downarrow}^{\dagger}], \\ \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) &= (\Phi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t), \Phi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}, t)) = \sum_n [\varphi_n^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \gamma_{n\uparrow}^{\dagger} + \varphi_{\bar{n}}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \gamma_{n\downarrow}] \end{aligned} \quad (1.40)$$

con

$$\varphi_n(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}, t) \\ v_n(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \text{ y } \varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} -v_n^*(\mathbf{r}, t) \\ u_n^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (1.41)$$

con $\Phi_\alpha(\mathbf{r}, t)$ y $\Phi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t)$ operadores de campo fermiónicos que destruyen o crean un electrón con espín ($\alpha = \uparrow$ o $\alpha = \downarrow$), en la posición \mathbf{r} y en el tiempo t , en las definiciones (1.40) se usan las transformaciones de Bogoliubov [3] para escribir los operadores de campo en función de los operadores de destrucción o creación de cuasipartículas $\gamma_{n\uparrow}$ y $\gamma_{n\downarrow}^\dagger$. Las funciones $\varphi_n(\mathbf{r}, t)$ y $\varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r}, t)$ son soluciones de las ecuaciones de *BdG* que para sistemas dependientes del tiempo

$$\varphi_n(\mathbf{r}, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(\mathbf{r}) \text{ y } \varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r}, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r}), \quad (1.42)$$

con $\varphi_n(\mathbf{r})$ y $\varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r})$ las funciones propias asociadas a los valores propios de energía $E_n > 0$ y $-E_n < 0$ respectivamente y forman un conjunto ortonormal completo [135]. Definimos la función de Green retardada [136] como

$$\hat{G}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t') \right]_+ \right\rangle, \quad (1.43)$$

de (1.40)

$$\hat{G}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = -i\theta(t - t') \sum_n \left(\varphi_n(\mathbf{r}, t) \varphi_n(\mathbf{r}', t')^\dagger + \varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r}, t) \varphi_{\bar{n}}(\mathbf{r}', t')^\dagger \right). \quad (1.44)$$

Aplicando el operador $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ a la ecuación (1.44) y usando la ecuación de *BdG* (1.19) se muestra que \hat{G}^r cumple las ecuaciones inhomogéneas de *BdG*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{G}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') - \int d\mathbf{r}'' \hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', t) \hat{G}^r(\mathbf{r}'', t, \mathbf{r}', t') = \hbar \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.45)$$

con

$$\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \begin{pmatrix} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{H}_e(\mathbf{r}, t) & \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \\ \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) & -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \mathbf{H}_e^*(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (1.46)$$

donde $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ es un hamiltoniano electrónico. La función de Green \hat{G} en (1.45) es la asociada a las ecuaciones de *BdG*. Se puede mostrar que las cuasipartículas cumplen la ecuación

$$\theta(t - t') \varphi(\mathbf{r}, t) = i \int d\mathbf{r}' \hat{\mathbf{G}}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \varphi(\mathbf{r}', t'), \quad (1.47)$$

con

$$\hat{\mathbf{G}}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \begin{pmatrix} \hat{G}_{11}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') & \hat{G}_{12}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \\ \hat{G}_{21}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') & \hat{G}_{22}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \end{pmatrix}. \quad (1.48)$$

La ecuación (1.47) representa la formulación integral de las ecuaciones de *BdG* donde se observa claramente que \hat{G}^r es el propagador de cuasipartículas retardado de \mathbf{r}, t a \mathbf{r}', t' con $t' < t$. La componente \hat{G}_{11}^r (\hat{G}_{22}^r) se puede interpretar como propagador de la componente electrón - electrón (hueco - hueco) y \hat{G}_{12}^r (\hat{G}_{21}^r) como el propagador electrón - hueco (hueco - electrón). Si el hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo la función de Green se puede escribir como

$$\hat{G}^r(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \hat{G}^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}', (t - t')) = \hat{G}^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau), \quad (1.49)$$

y podemos definir su transformada de Fourier como

$$\hat{G}^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE\tau/\hbar} \hat{G}^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau), \quad (1.50)$$

la cual cumple con la ecuación

$$E \hat{G}^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) - \int d\mathbf{r}'' H(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \hat{G}^r(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', E) = \hbar \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.51)$$

Cálculo de las funciones de Green

Para calcular las funciones de Green se consideran las soluciones de las ecuaciones de BdG que cumplen condiciones de frontera asintóticas; éste método se aplica para encontrar la función de Green de ecuaciones diferenciales como la ecuación de Stur - Luville [137] y por ejemplo, puede ser aplicado a la ecuación de Schrödinger [138], donde la función de Green se construye como

$$G(x, x') = \varphi_1(x_<) \varphi_2(x_>) \quad (1.52)$$

con $x_<$ y $x_>$ las coordenadas para $x < x'$ y $x > x'$ respectivamente, $\varphi_1(x_<)$ y $\varphi_2(x_>)$ son las soluciones asintóticas de la ecuación diferencial para $x \rightarrow -\infty$ y $x \rightarrow \infty$ respectivamente. Para el caso superconductor la función de Green es matricial, por lo que se debe construir a partir de los productos tensoriales de las funciones de onda espinorial de la forma

$$\hat{G}(x, x') \propto \varphi(x_<) \varphi^T(x_>), \quad (1.53)$$

donde $\varphi^T(x_>)$ es solución en la dirección x de las ecuaciones de BdG transpuesta, donde hemos supuesto invariancia traslacional, de tal manera que las soluciones de las ecuaciones de BdG se escriben como

$$\varphi^T(\mathbf{r}) = e^{-ik_y y} \varphi^T(x). \quad (1.54)$$

El método de las funciones de Green se ha implementado en superconductividad para junturas NS [101] y SIS [139] con superconductores isotrópicos y en junturas NIS [86] y SIS [30, 86] con superconductores anisotrópicos; se ha planteado una solución general valida para cualquier tipo de junta la cual se ha aplicado en junturas NSN , $NISN$ y un medio semi - infinito [111]. Actualmente el método de las funciones de Green se ha desarrollado para junturas que involucran el grafeno con fronteras “armchair” y “zigzag” y superconductores [140].

1.3.3. Ecuación de Dyson

Un elemento fundamental para la descripción de las propiedades de transporte utilizando las funciones de Green es la ecuación de Dyson; en ésta se introduce el concepto de autoenergía y puede ser encontrada a partir de la función de Green que cumple las ecuaciones inhomogéneas de BdG (1.45), suponiendo que el sistema es perturbado por un potencial $V(\mathbf{r})$ externo, tal que el hamiltoniano del sistema es $H(\mathbf{r}) = H_0 + V(\mathbf{r})$, con H_0 el hamiltoniano sin perturbación. La dinámica del sistema se escribe como

$$[E - H_0(\mathbf{r})] \varphi^0(\mathbf{r}) = 0, \quad (1.55)$$

$$[E - H(\mathbf{r})] \varphi(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}). \quad (1.56)$$

La solución de la ecuación (1.56) es

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^0(\mathbf{r}) + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (1.57)$$

donde

$$[E - H_0(\mathbf{r})] g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Teniendo en cuenta que $\varphi(\mathbf{r}')$ también es solución de (1.56) y puede ser escrita como (1.57), la solución general se puede escribir de manera iterativa como

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^0(\mathbf{r}) + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \varphi^0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (1.58)$$

$$\begin{aligned} & + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') g^r(\mathbf{r}', \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}', \\ & = \varphi^0(\mathbf{r}) + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \varphi^0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') g^r(\mathbf{r}', \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) \varphi^0(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}' \\ & + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') g^r(\mathbf{r}', \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2) \varphi^0(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}' + \dots \end{aligned} \quad (1.59)$$

Haciendo cambios de variables y reordenando los términos es posible factorizar $V(\mathbf{r}') \varphi^0(\mathbf{r}')$ en la expresión (1.58) para encontrar una solución general de la forma

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) = \varphi^0(\mathbf{r}) + \int \left\{ g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') d\mathbf{r}_1 \right. \\ \left. + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2) g^r(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_1 + \dots \right\} V(\mathbf{r}') \varphi^0(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Teniendo en cuenta que

$$[E - H(\mathbf{r})] G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.61)$$

la solución para (1.56) puede ser escrita como

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi^0(\mathbf{r}) + \int G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (1.62)$$

Comparando (1.60) y (1.62) la función de Green $G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es

$$G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') d\mathbf{r}_1 \quad (1.63)$$

$$+ \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2) g^r(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_1 + \dots \quad (1.64)$$

$$\begin{aligned} & = g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) \\ & \quad \left\{ g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') + \int g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2) g^r(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) g^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') d\mathbf{r}_2 + \dots \right\} d\mathbf{r}_1 \end{aligned} \quad (1.65)$$

La expresión entre corchetes corresponde a la función de Green $G^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')$, reescribiendo la ecuación (1.63) se tiene

$$G^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int g^r(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) V(\mathbf{r}_1) G^r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') d\mathbf{r}_1 \quad (1.66)$$

La ecuación (1.66) corresponde a la ecuación de Dyson para un potencial externo, la cual puede ser escrita en el espacio (k, E) de la forma

$$G_{\mathbf{k}}^r(E) = g_{\mathbf{k}}^r(E) + g_{\mathbf{k}}^r(E) \Sigma^r(\mathbf{k}, E) G_{\mathbf{k}}^r(E), \quad (1.67)$$

con $\Sigma^r(\mathbf{k}, E)$ denominada autoenergía, la cual representa la interacción entre la partícula y la perturbación generada en el sistema por éstas. Para más detalles acerca de la ecuación de Dyson ver [141–143].

1.3.4. Formalismo de Keldysh

Cuando se tiene un sistema fuera del equilibrio el formalismo perturbativo no es aplicable, sin embargo es posible generalizar el formalismo de equilibrio mediante las funciones de Green. Considerando el hamiltoniano del sistema como $H = H_0 + V(t)$, con H_0 el hamiltoniano sin perturbar y $V(t)$ la perturbación y teniendo en cuenta que la perturbación depende del tiempo t , se supone que la perturbación se aplica o se retira adiabáticamente en $t = -\infty$ y $t = \infty$ respectivamente (sustituyendo $V(t) \rightarrow e^{-\eta|t|}V(t)$). En equilibrio se tiene simetría temporal de tal forma que en $t = \infty$ se recupera el mismo estado Ψ_0 que se tenía en $t = -\infty$ con una diferencia de fase, fuera del equilibrio esto no se cumple y al hacer evolucionar el sistema en el tiempo estará en un estado $\varphi(t)$ a tiempo t , ésto lleva a que el valor medio de los operadores sea

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}(-\infty, t) A(t) \mathbf{S}(t, -\infty) | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}(-\infty, t) \mathbf{S}(t, -\infty) | \varphi_0 \rangle}, \quad (1.68)$$

diferente al que se obtiene cuando se considera simetría temporal ya que no es posible utilizar el operador evolución temporal para dividir \mathbf{S} en diferentes funciones ordenadas temporalmente. Para solucionar este problema Keldysh propone modificar el contorno temporal de tal forma que (1.68) este ordenado temporalmente, éste contorno es conocido como el contorno de Keldysh y se representa en la figura 1.11.

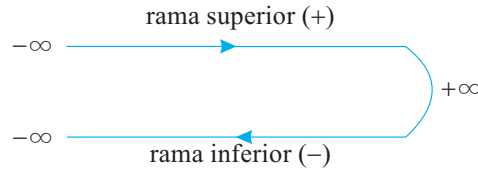


Fig. 1.11. Contorno temporal de Keldysh. Los tiempos empiezan en $-\infty$ en la rama de arriba (+) evolucionando hasta un tiempo arbitrariamente grande $+\infty$, para posteriormente volver a $t = -\infty$ por la rama de abajo (-).

Tomando el contorno temporal de Keldysh el promedio de los operadores es

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}_-(-\infty, \infty) \mathbf{S}_+(\infty, t) A(t) \mathbf{S}_+(t, -\infty) | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}_-(-\infty, \infty) \mathbf{S}_+(\infty, t) \mathbf{S}_+(t, -\infty) | \varphi_0 \rangle}, \quad (1.69)$$

si el t está en la rama de arriba y

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}_-(-\infty, t) A(t) \mathbf{S}_-(t, \infty) \mathbf{S}_+(\infty, -\infty) | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}_-(-\infty, t) \mathbf{S}_-(t, \infty) \mathbf{S}_+(\infty, -\infty) | \varphi_0 \rangle}, \quad (1.70)$$

si t esta en la rama inferior. Definiendo \mathbf{T}_c como el operador de ordenamiento temporal en el contorno de Keldysh, el valor medio del operador es

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{\langle \varphi_0 | \mathbf{T}_c [A(t) \mathbf{S}_-(-\infty, \infty) \mathbf{S}_+(\infty, -\infty)] | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}_-(-\infty, \infty) \mathbf{S}_+(\infty, -\infty) | \varphi_0 \rangle}. \quad (1.71)$$

Definiendo el operador temporal en el contorno de Keldysh como $\mathbf{S}_c(\infty, -\infty) \equiv \mathbf{S}_-(-\infty, \infty)$ $\mathbf{S}_+(\infty, -\infty)$ el operador (1.71) se escribe como

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{\langle \varphi_0 | \mathbf{T}_c [A(t) \mathbf{S}_c(-\infty, \infty)] | \varphi_0 \rangle}{\langle \varphi_0 | \mathbf{S}_c(-\infty, \infty) | \varphi_0 \rangle}. \quad (1.72)$$

En el contorno de Keldysh se necesita distinguir los tiempos dependiendo de la rama (t_+ o t_-); ésto implica que existen cuatro posibilidades en los argumentos temporales cuando se definen propagadores, de forma análoga a la función de Green causal

$$G_{i,j}^{\alpha\beta}(t,t') = \frac{-i\langle\varphi|\mathbf{T}_c[\mathbf{c}_{i\sigma}(t_\alpha)\mathbf{c}_{j\sigma}^\dagger(t'_\beta)]|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}, \quad (1.73)$$

donde α y β toman valores $+$ y $-$, dependiendo de la rama del tiempo, dando lugar a cuatro propagadores que en notación matricial son

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^{++} & G^{+-} \\ G^{-+} & G^{--} \end{pmatrix} \quad (1.74)$$

donde G^{++} representa la función de Green causal en la rama superior, $G^{+-(-+)}$ se relaciona con la distribución de partículas fuera del equilibrio a tiempos iguales y puede ser relacionada con la corriente y G^{--} representa una función de Green causal pero con los tiempos ordenados sobre la rama inferior (no causal), éstas cuatro funciones de Green no son independientes entre si por lo que se pueden escribir como

$$G^{++} + G^{--} = G^{+-} + G^{-+}. \quad (1.75)$$

También es posible encontrar una relación entre las funciones G^{+-} y G^{-+} y las funciones de Green retardada y avanzada de la forma

$$G^{+-} - G^{-+} = G^a - G^r \quad (1.76)$$

esta representación puede ser útil a la hora de estudiar el transporte.

1.3.5. Aproximación hamiltoniana

Para modelar los contactos o terminales acoplados al superconductor se recurre a utilizar la aproximación hamiltoniana [83], donde se escribe un hamiltoniano para cada terminal izquierda L , derecha R y uno que da cuenta del acople entre las terminales de la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \sum_{\sigma} \left(t \hat{c}_{L\sigma}^\dagger(\tau) \hat{c}_{R\sigma}(\tau) + t^* \hat{c}_{R\sigma}^\dagger(\tau) \hat{c}_{L\sigma}(\tau) \right) - \mu_L \hat{N}_L(\tau) - \mu_R \hat{N}_R(\tau), \quad (1.77)$$

donde

$$\mu_L = \frac{eV}{2}, \quad \mu_R = -\frac{eV}{2} \quad (1.78)$$

y

$$\hat{N}_L(\tau) = \sum_{\sigma} \hat{c}_{L\sigma}^\dagger(\tau) \hat{c}_{L\sigma}(\tau), \quad \hat{N}_R(\tau) = \sum_{\sigma} \hat{c}_{R\sigma}^\dagger(\tau) \hat{c}_{R\sigma}(\tau), \quad (1.79)$$

los operadores $\hat{c}_{L(R)\sigma}^\dagger(\tau)$ y $\hat{c}_{L(R)\sigma}(\tau)$ representan la creación o destrucción de un electrón, en $L(R)$ en el estado σ y en el instante τ respectivamente. En el hamiltoniano de acople se introduce un parámetro (“hopping”) t el cual juega el papel de un término que perturba en el sistema y se puede relacionar con la autoenergía debida al acople.

La corriente promedio en este sistema se define como

$$I(\tau) = -e \left\langle \frac{d}{d\tau} \hat{N}_L(\tau) \right\rangle \quad (1.80)$$

con

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{d\tau} \hat{N}_L(\tau) &= [\hat{N}_L(\tau), \hat{H}]_- \\ &= \sum_{\sigma} \left(t \hat{c}_{L\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{R\sigma}(\tau) - t^* \hat{c}_{R\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{L\sigma}(\tau) \right) \end{aligned} \quad (1.81)$$

de tal manera que la corriente es

$$I(\tau) = i \frac{e}{\hbar} \sum_{\sigma} \left(t \left\langle \hat{c}_{L\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{R\sigma}(\tau) \right\rangle - t^* \left\langle \hat{c}_{R\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{L\sigma}(\tau) \right\rangle \right), \quad (1.82)$$

ésta corriente se puede escribir en términos de funciones de Green de Keldysh $\hat{G}_{i,j}^{+-}$, para ello definamos en siguiente operador espinorial en la notación de Nambu

$$\hat{C}_i = \begin{pmatrix} \hat{c}_{i\uparrow}(\tau) \\ \hat{c}_{i\downarrow}^{\dagger}(\tau) \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_i^{\dagger} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{i\uparrow}^{\dagger}(\tau) & \hat{c}_{i\downarrow}(\tau) \end{pmatrix}. \quad (1.83)$$

Definamos las función de Green como

$$\hat{G}_{ij}^{\alpha\beta}(\tau_{\alpha}, \tau'_{\beta}) = -i \left\langle \hat{T} \left[\hat{C}_i(\tau_{\alpha}) \hat{C}_j^{\dagger}(\tau'_{\beta}) \right] \right\rangle, \quad (1.84)$$

donde T es el operador de ordenamiento temporal de Keldysh y los índices $\alpha = +(-)$ y $\beta = -(+)$ indican las ramas temporales en el contorno temporal de Keldysh.

Las funciones de Green de todo el sistema (superconductor y terminales) cumplen una ecuación de Dyson, la cual puede ser resuelta a cualquier orden de perturbación en el caso de estados estacionarios [83, 144].

La corriente en función de \hat{G}^{+-} es escrita como

$$I(\tau) = \frac{e}{\hbar} \text{tr} \left[\hat{\sigma}_Z \left(\hat{t}^* \hat{G}_{LR}^{+-}(\tau, \tau) - \hat{t} \hat{G}_{RL}^{+-}(\tau, \tau) \right) \right], \quad (1.85)$$

con \hat{t} describe el acople en espacio de Nambu como

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & -t^* \end{pmatrix}. \quad (1.86)$$

Las funciones de Green de no equilibrio se pueden encontrar a partir de las funciones de Green en equilibrio $\hat{g}^{(+ -)(- +)}(\tau, \tau')$ [143], como

$$\hat{G}^{(+ -)(- +)}(\tau, \tau') = \left[\hat{I} + \hat{G}^r(\tau, \tau') \hat{\Sigma}^r(\tau) \right] \hat{g}^{(+ -)(- +)}(\tau, \tau') \left[\hat{I} + \hat{\Sigma}^a(\tau) \hat{G}^a(\tau, \tau') \right], \quad (1.87)$$

donde $\hat{G}^{r,a}$, son las funciones de Green retardada y avanzada que cumplen la ecuación de Dyson

$$\hat{G}^{r(a)}(\tau, \tau') = \hat{g}^{r(a)}(\tau, \tau') + \hat{g}^{r(a)}(\tau, \tau') \hat{\Sigma}(\tau) \hat{G}(\tau, \tau') \quad (1.88)$$

y $\hat{\Sigma}(\tau)$ es la autoenergía que está relacionada con el parámetro de acople como $\hat{\Sigma}_{LR}^{r(a)} = \left(\hat{\Sigma}_{RL}^{r(a)} \right)^* = \hat{t}$ y $\hat{\Sigma}_{LL}^{r(a)} = \hat{\Sigma}_{RR}^{r(a)} = 0$.

Propiedades de transporte en superconductores de alta temperatura crítica

En este capítulo se estudian junturas formadas por metales normales y superconductores de alta temperatura crítica, que pueden ser cupratos (S) o superconductores con base en hierro (S'). Uno de los temas que se estudia en superconductores de alta temperatura crítica es la simetría de su potencial de pares. En una juntura NIS con simetría d , por ejemplo, la conductancia diferencial presenta un máximo a voltaje cero, denominado “zero bias conductance peak” que llamaremos $ZBCP$ por sus siglas en inglés [6, 21, 24, 25, 145]. En la juntura N_LISIN_R , se presentan oscilaciones en la conductancia diferencial conocidas como efecto Tomasch [98] que han sido explicadas con ayuda de las reflexiones de Andreev para superconductores con potencial de pares isotrópico [79]; recientemente el efecto Tomasch ha sido observado en junturas tipo rampa [102, 146], un análisis completo sobre este efecto para una juntura $NISN$ anisotrópica se encuentra en [147]. En el programa de maestría desarrollamos un modelo teórico que nos permite analizar la conductancia diferencial en una juntura de doble barrera aislante N_LISIN_R para simetría s , $d_{x^2-y^2}$ y d_{xy} , a partir de los coeficientes de reflexión electrón - electrón y electrón - hueco; para ello se resolvieron las ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes (BdG) y se determinó que la aparición de las resonancias en la conductancia diferencial está relacionada con la formación de estados cuasiligados en la región ISI [148, 149].

En este capítulo nos interesa continuar los estudios realizados en la juntura N_LISIN_R analizando ahora la conductancia diferencial cruzada. En la actualidad la posibilidad de que las reflexiones de Andreev cruzadas CAR dominen el transporte eléctrico en multiterminales ha llamado la atención debido a la posibilidad de usar este tipo de sistemas como fuentes de electrones entrelazados [40, 41, 43, 44, 48]; éste tipo de sistemas ha sido estudiado experimentalmente usando superconductores con simetría s [48], donde el cotunelamiento EC o las CAR predominan dependiendo del voltaje aplicado o de los electrodos normales. Por otro lado, las reflexiones de Andreev son una herramienta sensitiva para analizar el transporte eléctrico en sistemas con superconductores de alta temperatura crítica, que pueden ser afectadas por el potencial de pares del superconductor [6]. En los últimos años fue posible encontrar evidencia indirecta de CAR en superconductores HTc [150], pero un estudio donde se incluya el efecto de la simetría del potencial de pares en las CAR y EC en junturas con base en cupratos no se ha realizado. En este capítulo hacemos un primer acercamiento al estudio de procesos no locales para cupratos analizando la variación de la conductancia diferencial cruzada con el ancho de la región superconductora.

En el caso de los superconductores con base Fe el estudio de la propiedades de transporte no local se realiza teniendo en cuenta que en este tipo de superconductores se denominan multi - bandas debido a que presenta más de una banda cerca al nivel de Fermi. La simetría del parámetro de orden en este tipo de superconductores se ha determinado a través de experimen-

tos de detección de modos de resonancia de neutrones [12–14] y dispersiones de cuasipartículas en espectroscopía “Tunneling” [15, 16], como tipo s . En este capítulo usamos un modelo teórico basado en las funciones de Green que nos permite analizar el efecto de la simetría del parámetro de orden del superconductor con base en Fe sobre la conductancia diferencial cruzada.

2.1. Juntura de doble barrera aislante

Para estudiar el efecto de las dispersiones no locales sobre las propiedades de transporte utilizamos la juntura de doble barrera aislante N_LISIN_R ver fig. 2.1, donde $N_{L(R)}$ es el metal normal semi - infinito a la izquierda (derecha) del superconductor S que en este caso representa un cuprato e I el aislante que da cuenta del acople no perfecto entre las interfases y es modelado por una barrera de potencial de ancho d y altura V_0 , y que aproximamos a una función Delta de Dirac $\delta(x)$ en $x = 0$ y $x = a$ como

$$V_{N_I}(0) = \gamma\delta(0) \text{ y } V_{N_{II}}(a) = \gamma\delta(a) \text{ con } \gamma = d V_0. \quad (2.1)$$

El potencial de pares es modelado como $\Delta(\mathbf{k}, x) = \Delta(\mathbf{k})\Theta(x)\Theta(x - a)$, con $\Theta(x)$ la función de Heaveside y a el espesor de la región superconductora. En este modelo consideramos que los planos de CuO_2 coinciden con el plano $x - y$.

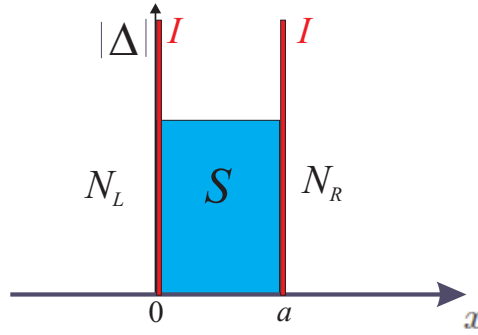


Fig. 2.1. Juntura de doble barrera aislante N_LISIN_R , donde la región superconductora se extiende desde $x = 0$ hasta $x = a$, puntos donde se encuentran las barreras aislantes.

Estudios que hemos realizado anteriormente con respecto a esta juntura muestran que las cuasipartículas en el superconductor forman estados de energía cuasiligados y el tiempo de vida de dichos estados depende de la fortaleza del barreras y del ancho del superconductor; éstos estados se presentan como oscilaciones en la conductancia diferencial que se denominan efecto Tomasch [148].

En este caso nos interesa estudiar las dispersiones no locales que ocurren entre los metales en estado normal en ambos lados del superconductor, para esto utilizamos las soluciones de las ecuaciones de BdG que como se explicó en el capítulo anterior pueden ser extendidas a superconductores de alta temperatura crítica.

2.1.1. Conductancia diferencial cruzada para la juntura de doble barrera aislante

En las junturas de doble barrera aislante se pueden presentar dos dispersiones no locales, la primera que relaciona al electrón incidente en N_L con el electrón en N_R , donde el electrón debe

hacer una transmisión de las dos barreras aislantes por lo que se denomina cotunelamiento EC ; la segunda que relaciona el electrón incidente en N_L con el hueco en N_R , la cual se denomina reflexión de Andreev cruzada CAR o no local y que involucra la formación de un par de Cooper en el superconductor, ver fig. 2.2.

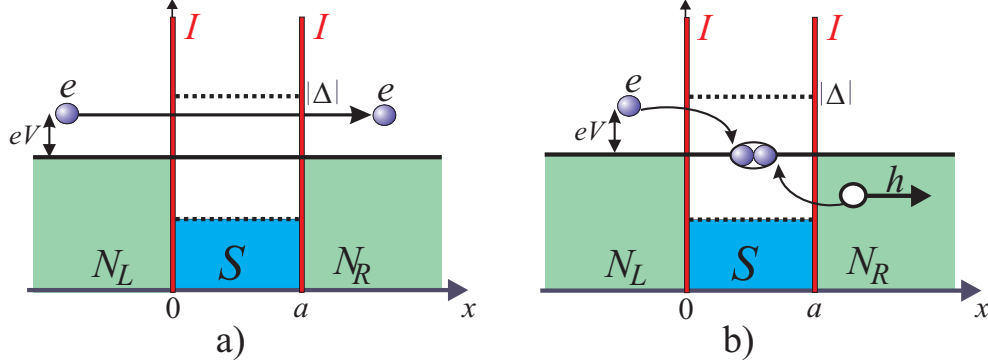


Fig. 2.2. Dispersiones no locales en la juntura de doble barrera aislante $N_L I S I N_R$, a) Cotunelamiento EC , b) Reflexión de Andreev cruzada CAR .

La probabilidad de que ocurran las dispersiones no locales se relacionan con los coeficientes de transmisión electrón - electrón T_{e-e} y electrón - hueco T_{e-h} entre las regiones N_L y N_R , los cuales se definen como

$$T_{e-e} = \frac{|J_{ex,t}|}{|J_{ex,i}|} \text{ y } T_{e-h} = \frac{|J_{hx,t}|}{|J_{ex,i}|}, \quad (2.2)$$

con $J_{ex,i}$ y $J_{e(h)x,t}$ son las componentes en dirección x ¹ de la densidad de corriente de probabilidad y los subíndices i y t representan incidente y transmitido respectivamente [151], éstas densidades de corrientes son

$$J_{ex,i(t)} = \frac{\hbar}{m} \text{Re}[-iu_{N_L(R)}^*(x) \partial_x u_{N_L(R)}(x)], \quad J_{hx,t} = -\frac{\hbar}{m} \text{Re}[-iv_{N_R}^*(x) \partial_x v_{N_R}(x)], \quad (2.3)$$

donde $u_{N_L(R)}(x)$ y $v_{N_R}(x)$ representan las componente de electrón y hueco de las soluciones de las ecuaciones de BdG 1.33 respectivamente, las cuales pueden ser escritas como

$$\varphi_{N_L}(x) = \begin{pmatrix} u_{N_L}(x) \\ v_{N_L}(x) \end{pmatrix} = U_1 e^{ik_+ x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + U_2 e^{-ik_+ x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + V_1 e^{ik_- x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

y

$$\varphi_{N_R}(x) = \begin{pmatrix} u_{N_R}(x) \\ v_{N_R}(x) \end{pmatrix} = U_3 e^{ik_+ x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + V_2 e^{ik_- x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

donde

$$k_{\pm} = \sqrt{k_{0xF}^2 \pm 2mE/\hbar^2}, \quad (2.6)$$

con $k_{0xF}^2 = k_F^2 - k_y^2$, y $k_F^2 = 2mE_F/\hbar^2$ el número de onda de Fermi. Estas soluciones se encuentran considerando que el electrón incide con un vector de onda $\mathbf{k}_e^+ = k_+ \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}$, y puede

¹Se toma unicamente la componente en dirección x debido a que las interfaces se consideran perpendiculares a esta dirección.

reflejarse como electrón con vector de onda $\mathbf{k}_e^- = -k_+ \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}$, o como hueco con vector de onda $\mathbf{k}_h^+ = k_- \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}$. Una descripción de estas dispersiones y otras puede verse en la fig. 2.3.

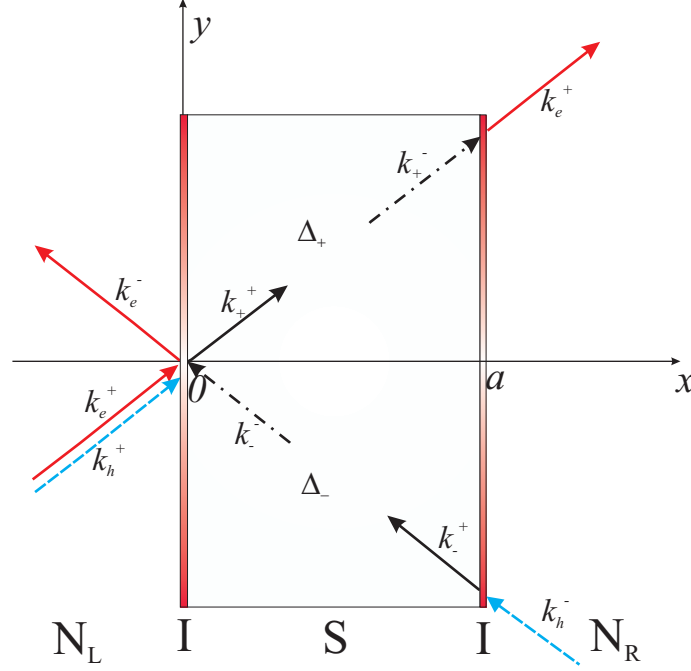


Fig. 2.3. Descripción de la dispersión de las cuasipartículas en la juntura $N_L I S I N_R$ mediante los vectores de onda. Un electrón incidente desde la región N_L con vector de onda k_e^+ hacia el aislante ubicado en $x = 0$ puede ser reflejado como un electrón con vector de onda k_e^- o como un hueco con vector de onda k_h^+ . Los electrones pueden ser transmitidos a la región superconductora como cuasipartículas tipo electrón k_+^+ o tipo hueco k_-^- , éstas a su vez pueden ser dispersadas por la barrera ubicada en $x = a$ como cuasipartículas tipo electrón k_+^+ o tipo hueco k_-^- . En la región N_R pueden encontrarse electrones o huecos transmitidos con vectores de onda k_e^+ y k_h^+ respectivamente. Las cuasipartículas que están descritas por los vectores de onda $k_+^\varepsilon = k_+^\varepsilon \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}$ se mueven en un potencial Δ_+ y aquellas con vector de onda $k_-^\varepsilon = -k_-^\varepsilon \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}$ se mueven en un potencial Δ_- . Cuando $\varepsilon = +$, la cuasipartícula tiene carga neta negativa, que denominamos tipo electrón Q_e mientras que si $\varepsilon = -$ tiene carga neta positiva y la denominamos como tipo hueco Q_h .

Reemplazando las soluciones (2.4) y (2.5) en las expresiones de las densidades de corriente de probabilidad (2.3) los coeficientes de transmisión (2.2) son

$$T_{e \rightarrow e} = \frac{|U_3|^2}{|U_1|^2} \text{ y } T_{e \rightarrow h} = \frac{k_- |V_2|^2}{k_+ |U_1|^2}. \quad (2.7)$$

Para encontrar los coeficientes de transmisión es necesario encontrar las amplitudes U_1 , U_3 y V_2 . Para esto se utilizan las condiciones de frontera

$$\varphi_{N_L}(0) = \varphi_S(0) \text{ y } \varphi_S(a) = \varphi_{N_R}(a) \quad (2.8)$$

y

$$\begin{aligned}\left.\frac{d\varphi_S(x)}{dx}\right|_{x=0} &= \left.\frac{d\varphi_{N_I}(x)}{dx}\right|_{x=0} + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\varphi_{N_L}(0), \\ \left.\frac{d\varphi_{N_R}(x)}{dx}\right|_{x=a} &= \left.\frac{d\varphi_S(x)}{dx}\right|_{x=a} + \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\varphi_{N_R}(a).\end{aligned}\quad (2.9)$$

Para esto es necesario utilizar la solución de las ecuaciones de *BdG* para el superconductor la cual es

$$\begin{aligned}\varphi_S(x) = \begin{pmatrix} u_S(x) \\ v_S(x) \end{pmatrix} &= C_+^+ e^{ik_+^+ x} \begin{pmatrix} u_0^+ \\ v_0^+ e^{-i\varphi_+} \end{pmatrix} + C_-^+ e^{-ik_-^+ x} \begin{pmatrix} u_0^- \\ v_0^- e^{-i\varphi_-} \end{pmatrix} \\ &+ C_+^- e^{ik_+^- x} \begin{pmatrix} v_0^+ \\ u_0^+ e^{-i\varphi_+} \end{pmatrix} + C_-^- e^{-ik_-^- x} \begin{pmatrix} v_0^- \\ u_0^- e^{-i\varphi_-} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (2.10)$$

donde

$$k_\pm^\varepsilon = \sqrt{k_{0xF}^2 + \varepsilon \frac{2m}{\hbar^2} \sqrt{E^2 - |\Delta_\pm|^2}}, \quad \text{con } \varepsilon = \pm \quad (2.11)$$

$$\text{y } \Delta_\pm = \Delta(\pm k_\pm^\varepsilon \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}) = |\Delta_\pm| e^{i\varphi_\pm}, \quad (2.12)$$

Los detalles del cálculo de las soluciones de las ecuaciones de *BdG* se encuentran en el apéndice [A](#).

Reemplazando las soluciones (2.4), (2.5) y (2.10) en las condiciones de frontera (2.8) y (2.9), se encuentran las amplitudes que acompañan a las soluciones de las ecuaciones de *BdG*, los cuales pueden ser vistos en las ecuaciones (A.38) - (A.44) del apéndice [A](#), utilizando las ecuaciones (2.7) es posible encontrar las expresiones para los coeficientes de transmisión electrón - electrón y electrón - hueco como

$$T_{e-e} = (1 + Z^2) \frac{|1 + e^{-i(k^+ - k^-)a} C \Gamma|^2}{D} \quad \text{y} \quad T_{e-h} = Z^2 (1 + Z^2) \frac{|B + C e^{-i(k^+ - k^-)a} A|^2}{D}, \quad (2.13)$$

donde

$$A = (1 - iZ)(e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} - \Gamma Q) + e^{-2ik^-a} (1 - \Gamma Q)(1 + iZ)e^{i(\varphi_+ - \varphi_-)}, \quad (2.14)$$

$$C = \frac{-e^{i(k^+ + k^-)a} (1 - iZ)(Z^2 Q - \Gamma(1 + Z^2)e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)}) + Z^2 (1 + iZ)e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} \Gamma(1 - \Gamma Q)}{e^{2ik^-a} (1 - iZ)(Z^2 \Gamma Q - (1 + Z^2)e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)}) - Z^2 (1 + iZ)e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} (1 - \Gamma Q)},$$

$$B = (1 - iZ)(\Gamma e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} - Q) + e^{-i(k^+ + k^-)a} (1 + iZ)\Gamma(1 - \Gamma Q)e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} \quad (2.15)$$

$$D = |(1 + C\Gamma)(1 + iZ) + Z^2(A + CB)|^2, \quad (2.16)$$

$$\Gamma = \frac{v_0}{u_0}, \quad Q = \frac{\Gamma(1 - e^{i(k^+ - k^-)a})}{(1 - e^{i(k^+ - k^-)a} \Gamma^2)}, \quad (2.17)$$

y

$$Z = \frac{m\gamma}{\hbar^2 k_{0xF}}, \quad (2.18)$$

con Z un parámetro denominado fortaleza de la barrera aislante, el cual para $Z = 0$ representa una barrera transparente y $Z \gg 1$ una interfase en el límite túnel y u_0 y v_0 descritos por

$$u_0 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{(E^2 - \Delta^2)^{1/2}}{E} \right)^{1/2} \quad \text{y} \quad v_0 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{(E^2 - \Delta^2)^{1/2}}{E} \right)^{1/2}.$$

Debido a que los estados que contribuyen a la superconductividad se encuentran cerca de la superficie de Fermi, podemos realizar las siguientes aproximaciones para el números de onda (2.6)

$$k_{0xF} \cong k_{xF} \cong k_F \cos \theta; \quad k_\varepsilon = k_{xF} + \varepsilon p \quad (2.19)$$

con

$$p = \frac{mE}{\hbar^2 k_{xF}} \quad (2.20)$$

y θ el ángulo entre la dirección de la partícula incidente y el vector normal a la interfase, éstas aproximaciones son validas si

$$\frac{|\Delta_\pm|}{E_F \cos^2 \theta} \ll 1$$

dado que $\frac{|\Delta_\pm|}{E_F} \approx 10^{-1} - 10^{-3}$, el ángulo θ debe tener un valor tal que $-0,98\pi/2 < \theta < 0,98\pi/2$, Con lo anterior tenemos que

$$\Delta(\pm k_{0xF} \mathbf{i} + k_y \mathbf{j}) \cong \Delta(\pm k_F \cos \theta \mathbf{i} + k_F \sin \theta \mathbf{j}) \equiv \Delta_\pm(\theta). \quad (2.21)$$

Los potenciales Δ_+ y Δ_- están relacionados por

$$\Delta_-(\theta) = \Delta_+(\pi - \theta) \quad (2.22)$$

y cada uno de estos potenciales puede ser escrito como $|\Delta_\pm| e^{i\varphi_\pm}$ donde las fases φ_- y φ_+ no se pueden eliminar bajo transformaciones de calibración como ocurre en el caso isotrópico.

Las probabilidades T_{e-e} y T_{e-h} se denominaran en adelante como P_{EC} y P_{CAR} respectivamente, éstas depende de la energía de inyección E , del ángulo de incidencia en la interfase θ del electrón, del ancho de la región superconductora, de la fortaleza de la barrera aislante y de la simetría del potencial de pares.

La conductancia diferencial cruzada es proporcional a la diferencia entre las probabilidades CAR y EC de la forma

$$\sigma_{LR} \simeq P_{CAR} - P_{EC},$$

la cual puede ser positiva o negativa dependiendo cual de los dos procesos tenga mayor probabilidad. Para encontrar la σ_{LR} es necesario considerar la contribución de todos los ángulos de incidencia de los electrones sobre la interfase $N_L IS$, por lo que las probabilidades se integran en θ .

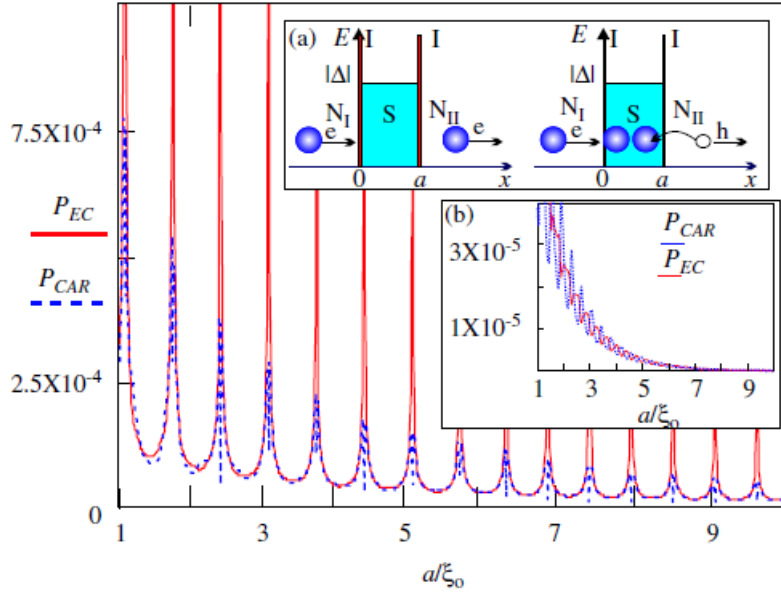


Fig. 2.4. Probabilidades CAR y EC en función del ancho de la región superconductora para simetría del parámetro de orden $d_{x^2-y^2}$. Las probabilidades son normalizadas a la probabilidad de dispersión local. a) Ilustración del sistema $NISIN$ mostrando los dos tipos de dispersión no local CAR (derecha) y EC (izquierda). b) Probabilidades CAR y EC en función del ancho de la región superconductora para simetría tipo s .

Cuando $a \gg \xi_0$, $E < |\Delta(\theta)|$ y se considera simetría s , $\Delta(\theta) = \Delta_0$, las probabilidades $P_{CAR(EC)}(\theta)$ decaen exponencialmente según $\exp(-2a/\pi\xi(\theta))$ donde $\xi(\theta) = \xi_0\Delta_0/(|\Delta(\theta)|^2 - E^2)^{1/2}$ representa una longitud de coherencia efectiva, mayor a la longitud de coherencia BCS ξ_0 , para $\theta > 0$. Teniendo en cuenta que las probabilidades P_{CAR} y P_{EC} tienen una contribución de cuasipartículas debidas a estados con energía menor a $\Delta(\theta)$ donde $\xi(\theta) > \xi_0$, el decrecimiento de estas con el ancho del superconductor a es menor para simetría $d_{x^2-y^2}$ en comparación con el decrecimiento para simetrías s como se muestra en la fig. 2.4b; en esta gráfica fig 2.4 es posible ver también que para simetría $d_{x^2-y^2}$, P_{EC} es en promedio mayor que P_{CAR} , por lo que la conductancia σ_{LR} es negativa como se ve en la fig. 2.5.

Para simetría s los procesos CAR y EC decaen con la misma amplitud pero con un corrimiento de fase, mientras que se mantienen en fase cuando la simetría es $d_{x^2-y^2}$.

Con el animo de obtener el predominio del proceso CAR sobre EC consideramos los metales normales con magnetización antiparalela, de tal forma que un electrón que incide con espín hacia arriba por uno de los contactos puede ser transmitido al otro contacto como un hueco con espín contrario al incidente, haciendo que $P_{CAR} > P_{EC}$. La conductancia mostrada en fig. 2.5 en función del ancho del superconductor a , presenta un decaimiento exponencial y valores positivos para voltaje cero, los cuales indican predominio de dispersiones CAR .

En conclusión hemos encontrado que los procesos CAR y EC tienen una amplitud mayor para simetría $d_{x^2-y^2}$ que para simetría s y mayor que EC para simetría $d_{x^2-y^2}$, cuando se consideran electrodos sin magnetización. Cuando los electrodos son magnetizados de manera antiparalela el proceso CAR predomina sobre el EC dando lugar a valores positivos de σ_{LR} ; éstos resultados pueden ser relevantes al proponer montajes experimentales para estudiar procesos relaciona-

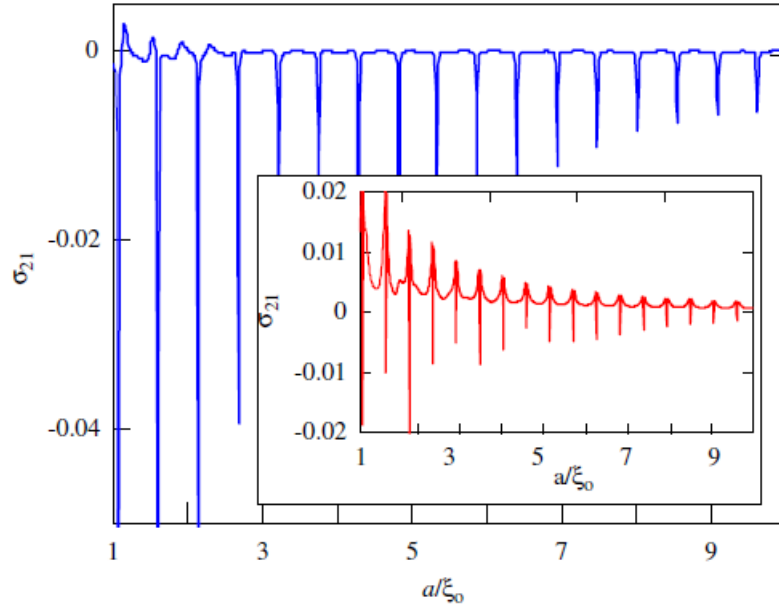


Fig. 2.5. Conductancia diferencial cruzada en función del ancho de la región superconductora para simetría $d_{x^2-y^2}$. En la figura insertada se muestra la conductancia diferencial en este caso cuando se consideran los contactos normales con magnetización antiparalela. La conductancia está normalizada a la conductancia diferencial local.

dos con CAR en superconductores de alta temperatura crítica y han sido reportados en la publicación [152].

2.2. Dos contactos sobre un superconductor con base en Fe

En los últimos años además de los cupratos se han encontrado nuevos superconductores de alta temperatura crítica, entre los que se encuentran los superconductores con base en Fe [11]; uno de los elementos de estudio de estos superconductores es su parámetro de orden ya que se consideran de multi - bandas debido a que presentan diferentes bandas cerca al nivel de Fermi [153]. Un modelo simplificado del parámetro de orden para los superconductores con base en Fe consiste en considerar que estos se componen de dos parámetros de orden Δ_1 y Δ_2 con simetrías tipo s_{++} o s_{+-} , la primera indica una diferencia de fase de cero entre los dos parámetros mientras que la segunda una diferencia de fase de π [154]. El efecto sobre las propiedades de transporte no local de la simetría del potencial de pares se ha estudiado considerando una juntura plana $NS'N$ y resolviendo las ecuaciones de BdG [50]. En este caso estamos interesados en analizar la conductancia diferencial no local en un sistema conformado por dos contactos normales a y b sobre un superconductor semi - infinito S' , como se muestra en la fig. 2.6, variando la distancia L entre los contactos y considerando que la simetría de S' puede ser s_{++} o s_{+-} .

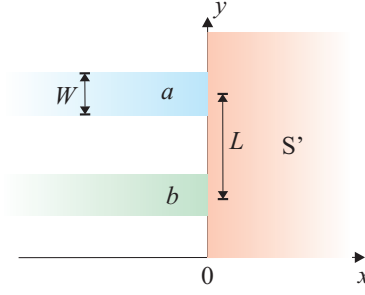


Fig. 2.6. Diagrama de dos contactos a y b en estado normal sobre un superconductor con base en $Fe\ S'$. L es la distancia entre los dos contactos y W representa en ancho del contacto.

2.2.1. Conductancia diferencial para dos contactos sobre un superconductor con base en Fe

A partir de las soluciones asintóticas de las ecuaciones de BdG (1.33) se encuentran las funciones de Green para un contacto normal y un superconductor siguiendo la metodología descrita en la sección 1.3.2. Las funciones de Green se utilizan en una representación de multiterminales

$$g = \begin{pmatrix} \hat{g}_{aa} & \hat{g}_{ab} \\ \hat{g}_{ba} & \hat{g}_{bb} \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

donde cada término corresponde a una función de Green en el espacio de Nambu en cada contacto $\hat{g}_{aa(bb)}$ o que acopla los dos contactos $\hat{g}_{ab(ba)}$. Las funciones de Green en los contactos normales son

$$g_L = -i \frac{2m}{\hbar^2 k_{Fx}} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

y para el superconductor

$$g_{S'} = -i \frac{2m}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \hat{g}_{Saa} & \hat{g}_{Sab} \\ \hat{g}_{Sba} & \hat{g}_{Sbb} \end{pmatrix}$$

donde I es la matriz identidad y las matrices $g_{Saa(bb)}$ y $g_{Sab(ba)}$ están dadas por

$$g_{Saa(bb)} = \int_{-\infty}^{\infty} dk_y g(E, k_y)$$

y

$$g_{Sab(ba)} = \int_{-\infty}^{\infty} dk_y g(E, k_y) e^{\pm i k_y y}$$

con $g(E, k_y)$ la función de Green para el superconductor con base en Fe en el espacio de Nambu, en la cual se realiza una superposición de las funciones de Green para los dos potenciales de pares correspondientes a cada banda Δ_1 y Δ_2 , determinada por el parámetro α adimensional que determina el peso en la superposición de cada función de la forma

$$g(E, k_y) = \frac{1}{1 + \alpha} (g_1(E, k_y) + \alpha g_2(E, k_y)) \quad (2.24)$$

con

$$g_{1(2)}(E, k_y) = \begin{pmatrix} \frac{E}{\Omega_{1(2)}} \left(f_1^{(l)}(k_y) + f_2^{(l)}(k_y) \right) & \frac{\Delta_{1(2)}}{\Omega_{1(2)}} f_1^{(l)}(k_y) \\ \frac{\Delta_{1(2)}}{\Omega_{1(2)}} f_1^{(l)}(k_y) & \frac{E}{\Omega_{1(2)}} \left(f_1^{(l)}(k_y) - f_2^{(l)}(k_y) \right) \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

donde

$$\begin{aligned} f_{1(2)}(k_y) &= \frac{1}{k_{+,1}(k_y)} \pm \frac{1}{k_{-,1}(k_y)}, \quad f'_{1(2)}(k_y) = \frac{1}{k_{+,2}(k_y)} \pm \frac{1}{k_{-,2}(k_y)}, \\ k_{\pm,1}(k_y) &= \sqrt{k_{xF}^2(k_y) \pm 2m\Omega_1/\hbar^2}, \quad k_{\pm,2}(k_y) = \sqrt{k_{xF}^2(k_y) \pm 2m\Omega_2/\hbar^2} \\ k_{xF}(k_y) &= \sqrt{k_F^2 - k_y^2} \text{ y } \Omega_{1(2)} = \sqrt{E^2 - |\Delta_{1(2)}|^2}, \end{aligned}$$

Utilizando la ecuación de Dyson encontramos la función de Green del sistema acoplado

$$G_L = g_L + g_L \Sigma_{LR} M_l g_S \Sigma_{RL} g_L = \begin{pmatrix} \hat{G}_{aa} & \hat{G}_{ab} \\ \hat{G}_{ba} & \hat{G}_{bb} \end{pmatrix}$$

con

$$M_l^{-1} = (I - g_S \Sigma_{RL} g_L \Sigma_{LR})^{-1}$$

y $\Sigma_{LR} = \Sigma_{RL}$ matriz que representa los acoples entre los contactos y el superconductor la cual puede escribirse como

$$\Sigma_{LR} = \begin{pmatrix} t_a \sigma_z & 0 \\ 0 & t_b \sigma_z \end{pmatrix},$$

donde σ_z es la matriz de Pauli y $t_{a(b)}$ es el parámetro de acople entre el contacto $a(b)$ y el superconductor y toma valores de 0 a 1. En este caso nos interesa encontrar las componentes no locales de la función de Green $G_{ab(ba)}$ y de estas componentes las relacionadas con las dispersiones electrón - electrón y electrón - hueco, ya que a partir de estas es posible encontrar las probabilidades de transmisión electrón - electrón $P_{EC} = |G_{ab-ee}|^2$ y transmisión electrón - hueco $P_{CAR} = |G_{ab-eh}|^2$, las cuales en el límite túnel y con $|y|, k_F \gg 1$ están dadas por

$$\begin{aligned} G_{ab-ee} &= i \frac{m}{\hbar^2 k_{Fx}} \frac{t_a^2}{(1+\alpha)} \sqrt{\frac{2\pi}{|L| k_F}} \left(\left(\frac{E}{\Omega_1} e^{-\frac{|L|}{\pi \xi_1(E)}} + \alpha \frac{E}{\Omega_2} e^{-\frac{|L|}{\pi \xi_2(E)}} \right) \cos \left(k_F |L| - \frac{\pi}{4} \right) \right. \\ &\quad \left. + i \left(e^{-\frac{|L|}{\pi \xi_1(E)}} + \alpha e^{-\frac{|L|}{\pi \xi_2(E)}} \right) \sin \left(k_F |L| - \frac{\pi}{4} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$G_{ab-eh} = i \frac{m}{\hbar^2 k_{Fx}} \frac{t_a^2}{(1+\alpha)} \sqrt{\frac{2\pi}{|L| k_F}} \left(\frac{\Delta_1}{\Omega_1} e^{-\frac{|L|}{\pi \xi_1(E)}} + \alpha \frac{\Delta_2}{\Omega_2} e^{-\frac{|L|}{\pi \xi_2(E)}} \right) \cos \left(k_F |L| - \frac{\pi}{4} \right), \quad (2.27)$$

$$\text{con } \xi_{1(2)}(E) = \frac{\xi_0 \Delta_{1(2)}}{(|\Delta_{1(2)}|^2 - E^2)^{1/2}}.$$

Cuando uno de los contactos normales es puesto a una diferencia de potencial V_b , ver fig. 2.7, la conductancia diferencial cruzada se encuentra como $\sigma_{ab} = \frac{\partial I_a}{\partial V_b} \sim (P_{CAR} - P_{EC})$. Cuando $eV = 0$ la conductancia diferencial cruzada normalizada a $\sigma_0 = \frac{8e^2}{h} \frac{t_a t_b}{(1+t_a t_b)^2}$, conductancia para dos contactos acoplados a un metal normal, se muestra en la fig. 2.8, en el límite túnel para

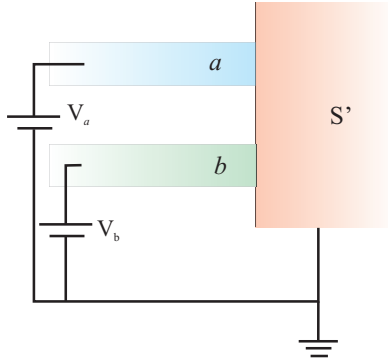


Fig. 2.7. Diagrama de dos contactos a y b en estado normal sobre un superconductor con base en $Fe S'$. A los dos contactos a y b se les aplican diferencias de potencial V_a y V_b respectivamente, mientras que el superconductor se encuentra conectado a tierra.

diferentes valores de α . En este caso se observa que la conductancia diferencial decae con la distancia entre los contactos para las dos simetrías, tomando valores positivos y negativos para simetría s_{++} y todos los valores de α , lo cual indica que las probabilidades P_{CAR} y P_{EC} en este caso son comparables. Para simetría s_{+-} la conductancia diferencial es negativa para valores de $\alpha = 0,5$ y 1 , lo cual indica un dominio de la probabilidad P_{EC} para estos valores.

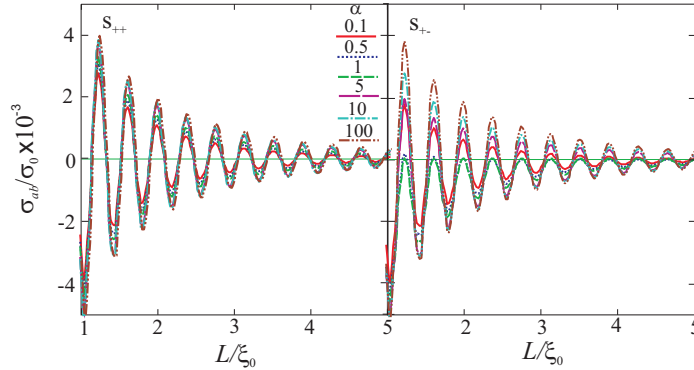


Fig. 2.8. Conductancia diferencial cruzada en función de la separación entre los contactos L para diferentes valores de α , con simetrías s_{++} y s_{+-} , $eV = 0$, $|\Delta_1| = |\Delta_0|$ y $|\Delta_2| = 0,5 |\Delta_0|$.

Además del límite túnel es posible analizar el efecto que la variación del parámetro de acople entre los contactos y el superconductor tiene sobre la conductancia diferencial cruzada, para esto se consideran tres diferentes valores de α y $t_a = t_b = t$, como se muestra en la fig. 2.9. En este caso se identifica que el límite túnel es el que presenta una mayor amplitud en σ_{ab} para cualquier valor de α , a medida el parámetro de acople aumenta la conductancia diferencial disminuye debido a que los procesos locales dominan; adicionalmente, es posible analizar en esta gráfica el efecto de la superposición de cada función de Green sobre la conductancia, cuando $\alpha = 0,1$, ver fig. 2.9 a y b, se da más peso a la función con potencial de pares Δ_1 por lo que la conductancia diferencial para las dos simetrías tiene un comportamiento similar. Cuando $\alpha = 1$, ver fig. 2.9 c y d, el efecto de Δ_1 y Δ_2 es comparable y la conductancia aumenta para simetría s_{++} mientras que se hace negativa para simetría s_{+-} , lo cual indica que el proceso dominante para esta última es P_{EC} . Para $\alpha = 100$, ver fig. 2.9 e y f, se incrementa el efecto de Δ_2 sobre la conductancia, lo cual hace que ésta aumente para las dos simetrías y sea similar al

de un superconductor isotrópico.

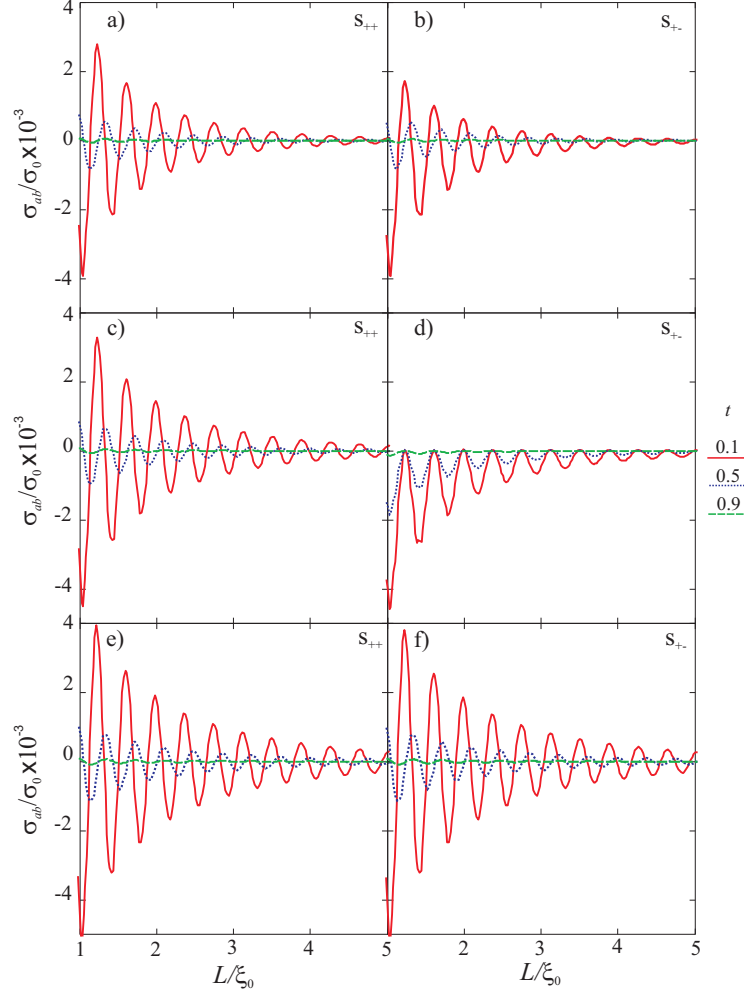


Fig. 2.9. Conductancia diferencial cruzada en función de la separación entre los contactos L , para $\alpha = 0,1$ en a) y b), $\alpha = 1$ en c) y d) y $\alpha = 100$ en e) y f) con simetrías s_{++} y s_{+-} , $eV = 0$, $|\Delta_1| = |\Delta_0|$ y $|\Delta_2| = 0,5 |\Delta_0|$.

Considerando ahora que eV se encuentra en un rango dado por $\Delta_2 < eV < \Delta_1$, se analiza la conductancia no local para diferentes valores de eV como se ilustra en fig. 2.10; en el límite túnel y $\alpha = 1$ se observa que cuando la energía es cercana al valor de Δ_1 la conductancia diferencial aumenta para las dos simetrías. Para simetría s_{++} cuando las energías toman valores entre Δ_1 y Δ_2 la conductancia diferencial se hace negativa, mientras que para simetría s_{+-} la conductancia diferencial, que es negativa para $eV = 0$, toma algunos valores positivos a partir de $eV = 0,78$; ésto indica que para eV entre Δ_1 y Δ_2 y simetría s_{++} los procesos más favorecidos son los locales mientras que para simetría s_{+-} éstos procesos disminuyen al aumentar la energía.

Encontrar que la conductancia diferencial no local presenta valores positivos para algún rango de energía crea la posibilidad de utilizar este tipo de sistemas como fuente de electrones entrelazados, ya que muestra un dominio de la probabilidad P_{CAR} sobre la conductancia. Cuando analizamos el comportamiento del decaimiento de esta probabilidad con la separación entre los contactos a partir de la expresión (2.27), para tres rangos de energía, encontramos que; en el

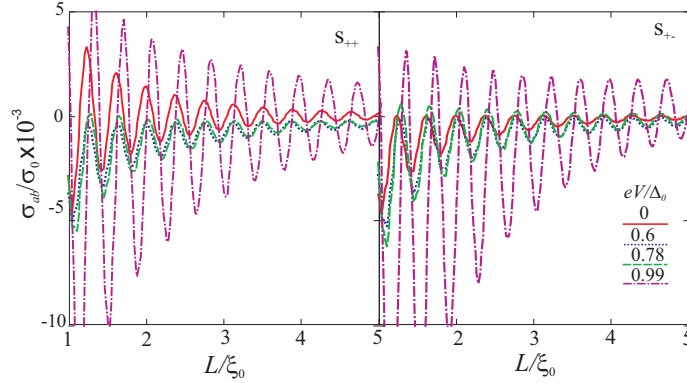


Fig. 2.10. Conductancia diferencial cruzada en función de la separación entre los contactos L , para $\alpha = 0,1$, con simetrías s_{++} y s_{+-} , $t = 0,1$, $|\Delta_1| = |\Delta_0|$ y $|\Delta_2| = 0,5 |\Delta_0|$.

primer rango para $eV < |\Delta_1|, |\Delta_2|$, como se ve en fig. 2.11, la conductancia diferencial decae de manera exponencial debido a que para estas energías la longitud de coherencia efectiva $\xi_{1(2)}(E)$ toma valores reales, en un segundo rango $|\Delta_2| < eV < |\Delta_1|$, la función $\xi_1(E)$ toma valores reales mientras que $\xi_2(E)$ es imaginaria, por lo que no se tiene decaimiento exponencial debido al término $e^{-\frac{|L|}{\pi\xi_2(E)}}$ y la probabilidad decae como $\sim \frac{2\pi}{|L|k_F} \left(e^{-\frac{2|L|}{\pi\xi_1}} + 1 \right)$, por último en el rango $eV > |\Delta_1|, |\Delta_2|$ el comportamiento de la probabilidad decae como el inverso de la distancia, ésto debido a que las cuasipartículas se pueden propagar libremente al tener una energía mayor al gap superconductor.

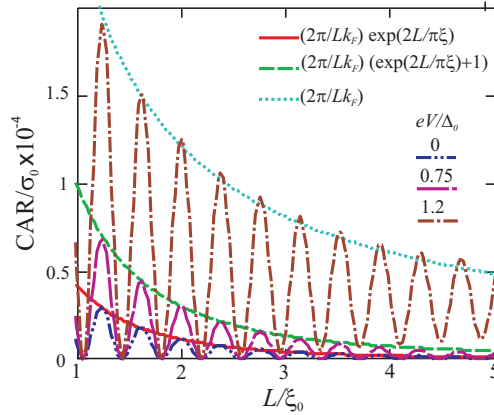


Fig. 2.11. Conductancia diferencial cruzada en función de la separación entre los contactos L para $\alpha = 0,1$, $t = 0,01$ y diferentes energías E , con simetrías s_{++} y s_{+-} , $|\Delta_1| = |\Delta_0|$ y $|\Delta_2| = 0,5 |\Delta_0|$.

Teniendo en cuenta que en el rango $eV > |\Delta_1|, |\Delta_2|$ la probabilidad $P_{EC} > P_{CAR}$, y que el decaimiento en el rango $|\Delta_2| < eV < |\Delta_1|$ es más lento que en $eV < |\Delta_1|, |\Delta_2|$, es posible encontrar un valor de eV entre los dos valores de la amplitud del potencial de pares donde la probabilidad P_{CAR} represente la dispersión dominante del sistema. El modelo desarrollado entonces es una herramienta para determinar parámetros de voltaje y distancia entre los contactos que permitan que la probabilidad $P_{CAR} > P_{EC}$, haciendo de este tipo de sistemas una fuente de electrones entrelazados usando superconductores con base en Fe .

Transporte eléctrico en sistemas superconductores con base en grafeno

En este capítulo se estudia el efecto de las fronteras en una juntura grafeno - superconductor sobre las propiedades de transporte. Esto teniendo en cuenta observaciones experimentales de láminas de grafeno con bordes determinados que son estables [72, 73] y que se han podido construir junturas con bordes bien definidos [74–76] donde es posible analizar la conductancia diferencial; adicionalmente, se ha mostrado la modificación del espectro de una nanocintas dependiendo del tipo de frontera “armchair” o “zigzag” [71] y se han observado reflexiones de Andreev en un sistema con base en grafeno formado por un superconductor, un punto cuántico y una región normal, en donde la formación de niveles de Andreev en el punto cuántico afecta la conductancia diferencial del sistema [66].

Desde la obtención del grafeno en el 2004 [155], y el estudio de sus particulares características [130], se ha creado gran interés sobre este material, principalmente por sus posibles aplicaciones electrónicas; adicionalmente, el espectro de energía lineal del grafeno [56] abre la posibilidad de planter un experimento donde se pueda comprobar la paradoja de Klein [67, 110].

El análisis de las propiedades de transporte en junturas con grafeno al cual se le induce superconductividad por efecto de proximidad [58, 59], ha cobrado interés en los últimos años. Actualmente se han investigado junturas *GS* en las que se observa la existencia de reflexiones de Andreev normales y especulares [60] y junturas *GIS* considerando pequeños anchos de la barrera aislante, en las que se encuentra que la conductancia diferencial presenta oscilaciones que dependen de del ancho y del potencial de la barrera [61].

En este capítulo se expone la metodología usada para encontrar la conductancia diferencial y la corriente eléctrica en junturas grafeno - superconductor considerando detalladamente los efectos de las diferentes fronteras “armchair” o “zigzag”.

3.1. Efecto de las fronteras

Estudios de cintas del orden de pocas capas atómicas formadas con grafeno (nanocintas) han determinado que el grafeno puede presentar un comportamiento conductor o aislante dependiendo del número de filas o celdas existentes dentro de la nanocinta, ésto se presenta para condiciones de frontera denominadas “armchair”. En el caso de fronteras “zigzag”, el comportamiento es conductor y aparecen estados de energía superficial alrededor de energía cero [71]. En la fig. 3.1 se ilustra una película de grafeno en dirección x con borde “zigzag” o “armchair”. El efecto de las fronteras se refleja en las funciones de Green de cada región, las cuales se pueden construir a partir de las funciones de onda que describen las diferentes fronteras de las interfases. Las funciones de onda se construyen como una superposición de las soluciones de las ecuaciones de Dirac en cada valle \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- , teniendo en cuenta que la interfase se considera en

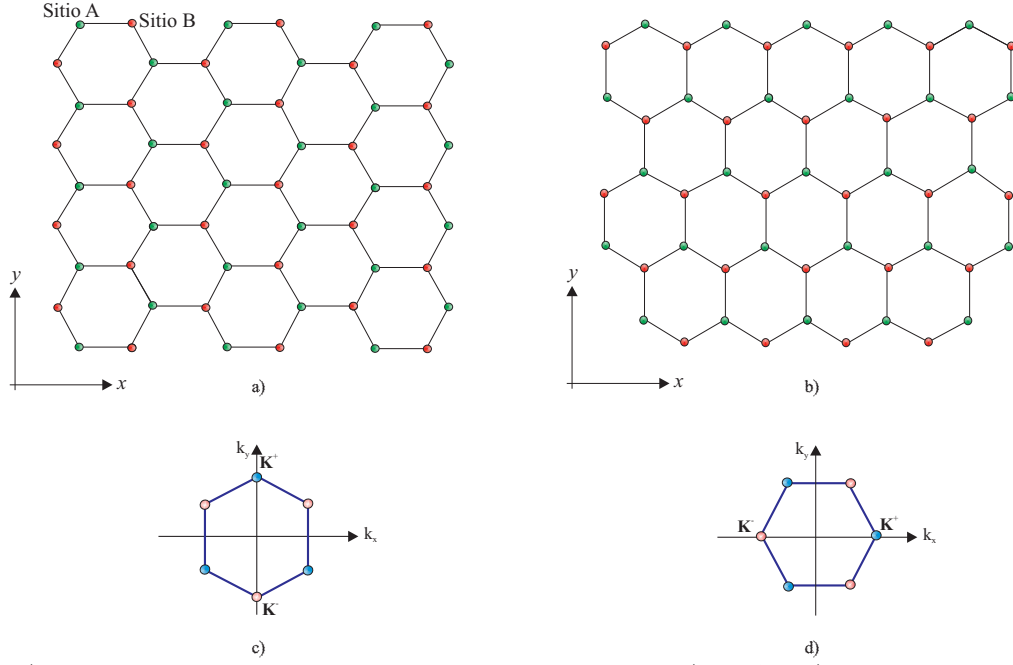


Fig. 3.1. a) En el caso “zigzag” solo átomos de una de las subredes (i.e., A ó B) están en el borde, b) En el caso “armchair” las dos subredes (i.e., A y B) se involucran en las condiciones de frontera. c) Primera zona de Brillouin en el caso de frontera “zigzag”, donde los vértices no equivalentes se encuentran en el eje k_y . d) Primera zona de Brillouin en el caso de frontera “armchair”, donde los vértices no equivalentes se encuentran en el eje k_x .

dirección x y que las láminas de grafeno se toman como infinitas en dirección y , el momentum en dirección y se conserva y la función de onda puede escribirse como $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(x, y) = e^{iqy}\phi(x)$, donde $\phi(x)$ es descrita en (1.34), en este caso las soluciones en cada valle \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- son

$$\begin{aligned}\hat{\psi}_+(x) &= a_1^+ e^{ikx} \hat{\varphi}_1 + a_2^+ e^{-ikx} \hat{\varphi}_2, \\ \hat{\psi}_-(x) &= a_2^- e^{ikx} \hat{\varphi}_2 + a_1^- e^{-ikx} \hat{\varphi}_1,\end{aligned}$$

con

$$\hat{\varphi}_1 = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \\ e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}, \hat{\varphi}_2 = \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} \\ -e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

y $e^{\pm i\alpha} = \hbar v(k \pm iq) / (E_F + E)$, las constantes $a_{1,2}^\pm$ son determinadas por las condiciones de frontera. La función de onda es entonces la superposición de las soluciones en cada valle, como vimos en (1.34)

$$\hat{\Phi}(x, y) = e^{iqy} \hat{\phi}(x) = e^{iqy} \left(e^{iKx} \hat{\psi}_+(x) + e^{-iKx} \hat{\psi}_-(x) \right) \quad (3.2)$$

Considerando el grado de libertad adicional correspondiente a la existencia de los valles, se puede construir la función de onda de cuatro componentes $\vec{\psi}^T = (\psi_+^T, \psi_-^T) = (\psi_+^A, \psi_+^B, \psi_-^A, \psi_-^B)$, ésta función cumple con la ecuación

$$\tilde{H}\tilde{\psi}(x) = E\tilde{\psi}(x), \quad (3.3)$$

donde

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_+ & 0 \\ 0 & \hat{H}_- \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

es una matriz 4×4 compuesta por los hamiltonianos de Dirac $\hat{H}_{+(-)}$ que corresponden a matrices 2×2 en el espacio de los valles \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- . La función de Green asociada a $\tilde{\psi}$ es

$$g(x, x', y) = \int g_\psi(x, x'; q) e^{iqy} dq \quad (3.5)$$

donde $g_\psi(x, x'; q)$ satisface la ecuación

$$\left(\tilde{H}(q) - E\tilde{I} \right) g_\psi(x, x'; q) = \delta(x - x') \tilde{I}. \quad (3.6)$$

En este caso la energía puede ser escrita con una parte imaginaria $E + i\epsilon$, cuando $\epsilon \rightarrow 0$ la función de Green obtenida a partir de las soluciones asintóticas de la ecuación (3.6) es retardada, este método de obtención de la función de Green es una extensión del utilizado en [38, 101] para las ecuaciones de BdG relativistas. La función de Green puede construirse como el producto tensorial de las funciones asintóticas como

$$g(x \leq x') \propto \tilde{\psi}_{<(>)}^\mu(x) \cdot \tilde{\psi}_{>(<)}^{\nu T}(x') \quad (3.7)$$

donde μ y ν representan los diferentes valles y $\tilde{\psi}_{<(>)}^\mu$ son las soluciones a izquierda y derecha que se determinan a partir de las condiciones de frontera. El cálculo detallado de las funciones de Green para sistemas con base en grafeno puede encontrarse en [140].

3.1.1. Frontera “armchair”

Cuando se aplican condiciones de frontera a una lámina de grafeno de bordes “armchair”, cuya principal característica es que combina átomos pertenecientes a las subredes A y B , la primera derivada de la función de onda debe anularse en las fronteras ubicadas en x_L y x_R , en este caso. La solución asintótica en este caso corresponde a ondas provenientes de un valle que se reflejan en el otro. La función de onda que es reflejada a la izquierda ($<$) o derecha ($>$) del borde puede ser escrita como

$$\psi_{<(>)}^+(x) = e^{\mp ikx} \begin{pmatrix} \hat{\varphi}_{2(1)} \\ 0 \end{pmatrix} + r_{L(R)}^+ e^{\pm ikx} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\varphi}_{2(1)} \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

$$\psi_{<(>)}^-(x) = e^{\mp ikx} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\varphi}_{1(2)} \end{pmatrix} + r_{L(R)}^- e^{\pm ikx} \begin{pmatrix} \hat{\varphi}_{1(2)} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Las amplitudes $r_{L,R}^\pm$ se encuentran aplicando condiciones de frontera a la función de onda (3.2) en los bordes de la lámina de grafeno de la forma, $\partial_x \phi(x)|_{x=x_L} = \partial_x \phi(x)|_{x=x_R} = 0$, en este caso los coeficientes son

$$r_R^\pm = e^{\mp 2i(K \mp k)x_R}, r_L^\pm = e^{\mp 2i(K \pm k)x_L}, \quad (3.10)$$

El cálculo detallado de las amplitudes en (3.10) se muestra en el apéndice B. Considerando que $x_L \in (-\infty, 0]$ y $x_R \in [0, \infty)$, es posible construir la función de Green de la lámina con bordes “armchair” como

$$g_\phi^{arm}(x, x') = \frac{-i\hat{\varphi}_1\hat{\varphi}_1^\dagger}{2\hbar v(1 - r_L^+ r_R^-) \cos \alpha} \left[e^{i(K+k)|x-x'|} + r_L^+ r_R^- e^{-i(K+k)|x-x'|} + \right. \\ \left. r_L^+ e^{i(K+k)(x+x')} + r_R^- e^{-i(K+k)(x+x')} \right] + \frac{-i\hat{\varphi}_2\hat{\varphi}_2^\dagger}{2\hbar v(1 - r_L^- r_R^+) \cos \alpha} \\ \left[e^{-i(K-k)|x-x'|} + r_L^- r_R^+ e^{i(K-k)|x-x'|} + r_L^- e^{-i(K-k)(x+x')} + r_R^+ e^{i(K-k)(x+x')} \right] \quad (3.11)$$

donde el subíndice ϕ de la función de Green indica que esta se calcula a partir de la superposición de las funciones (3.8) y (3.9) en cada valle.

3.1.2. Frontera “zigzag”

A diferencia de la frontera “armchair”, la frontera “zigzag” se forma solo por átomos de una subred por lo que no mezcla valles y se puede utilizar uno de los hamiltonianos de Dirac únicamente, cuando se considera que las fronteras de la lámina están ubicadas en x_L y x_R y que el hamiltoniano a utilizar para encontrar las funciones asintóticas es H_+ , las funciones de onda son

$$\psi_<(x) = e^{-ikx} \hat{\varphi}_2 + r_L e^{ikx} \hat{\varphi}_1, \quad (3.12)$$

$$\psi_>(x) = e^{ikx} \hat{\varphi}_1 + r_R e^{-ikx} \hat{\varphi}_2. \quad (3.13)$$

Las amplitudes de probabilidad de reflexión dependen, en este caso, de los átomos pertenecientes a cada una de las dos subredes, de tal forma que si los átomos pertenecen a la red $A(B)$ en el borde x_L , los átomos en el borde x_R sean $B(A)$, lo cual impone una condición de frontera de la forma $\phi_<(x_L)|_{A(B)} = \phi_<(x_R)|_{B(A)} = 0$, las amplitudes obtenidas (ver apéndice B) son

$$r_{L(R)}^A = -e^{\pm i\alpha} e^{\mp 2ikx_{L(R)}} \quad r_{L(R)}^B = e^{\mp i\alpha} e^{\mp 2ikx_{L(R)}} \quad (3.14)$$

A partir de las funciones asintóticas la función de Green para la frontera “zigzag” es, para $x < x'$

$$g_\phi^{zz}(x, x') = \frac{-i \left(e^{ik(x'-x)} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_2^\dagger + r_L^B e^{ik(x+x')} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_2^\dagger + r_R^A e^{-ik(x+x')} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_1^\dagger + r_L^B r_R^A e^{-ik(x'-x)} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_1^\dagger \right)}{2\hbar v \cos \alpha (1 - r_L^B r_R^A)}, \quad (3.15)$$

y para $x > x'$

$$g_\phi^{zz}(x, x') = \frac{-i \left(e^{ik(x'-x)} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_1^\dagger + r_L^B e^{ik(x+x')} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_1^\dagger + r_R^A e^{-ik(x+x')} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_2^\dagger + r_L^B r_R^A e^{-ik(x'-x)} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_2^\dagger \right)}{2\hbar v \cos \alpha (1 - r_L^B r_R^A)}, \quad (3.16)$$

Considerado la solución solo alrededor del valle \mathbf{K}^+ , si se escogiera en cambio el valle \mathbf{K}^- la función de Green corresponde a la anterior cambiando $\hat{\varphi}_{1,2} \longleftrightarrow \hat{\varphi}_{2,1}$.

3.2. Grafeno superconductor

Para construir la función de Green de un grafeno superconductor se considera una lámina de grafeno, donde se ha inducido un parámetro de orden Δ por efecto de proximidad. Teniendo en cuenta que el superconductor tiene la misma estructura del grafeno son consideradas las diferentes fronteras para calcular la función de Green.

3.2.1. Frontera “armchair”

Para la frontera “armchair” se presenta una combinación de subredes que se traduce en una combinación de valles en el espacio recíproco, por esto es necesario calcular la función de Green a partir de las soluciones asintóticas de las ecuaciones de *BdGD*, en los dos valles para las cuasipartículas en el superconductor representadas en el espacio de los valles de la forma

$$\begin{pmatrix} H_+ - E_F^S & \Delta & 0 & 0 \\ \Delta^* & -H_+ + E_F^S & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_- - E_F^S & \Delta \\ 0 & 0 & \Delta^* & -H_- + E_F^S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+^e \\ \psi_-^h \\ \psi_-^e \\ \psi_+^h \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_+^e \\ \psi_-^h \\ \psi_-^e \\ \psi_+^h \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

donde $\psi_{\pm}^{e,h}$ representa la función de onda de las cuasipartícula tipo electron o tipo hueco para cada valle y $E = \sqrt{\Delta^2 + (E_F^S - \hbar\nu\sqrt{k^2 + q^2})^2}$ es el espectro de energías cerca a los puntos de Dirac, cuando se considera un potencial de pares constante Δ .

En este trabajo consideramos una lámina superconductora semi - infinita, i.e., con x_L en $0(\infty)$ y x_R en $\infty(0)$, donde pueden existir reflexiones de cuasipartículas tipo electrón o tipo hueco, por lo que la función asintótica corresponde a la de una lámina de grafeno (3.8) y (3.9) donde se muestran las distintas dispersiones de electrón y hueco de la forma

$$\psi_{<}^{e(h)+}(x) = \left\{ e^{\mp i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} \varphi_{2e(1h)} \\ 0 \end{pmatrix} + r_{L,e(h)}^+ e^{\pm i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_{2e(1h)} \end{pmatrix} \right\} \otimes \begin{pmatrix} u(v) \\ v(u) \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

$$\psi_{>}^{e(h)+}(x) = \left\{ e^{\pm i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} \hat{\varphi}_{1e(2h)} \\ 0 \end{pmatrix} + r_{R,e(h)}^+ e^{\mp i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\varphi}_{1e(2h)} \end{pmatrix} \right\} \otimes \begin{pmatrix} u(v) \\ v(u) \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

$$\psi_{<}^{e(h)-}(x) = \left\{ e^{\mp i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\varphi}_{1e(2h)} \end{pmatrix} + r_{L,e(h)}^- e^{\pm i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} \hat{\varphi}_{1e(2h)} \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \otimes \begin{pmatrix} u(v) \\ v(u) \end{pmatrix}, \quad (3.20)$$

$$\psi_{>}^{e(h)-}(x) = \left\{ e^{\mp i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{\varphi}_{2e(1h)} \end{pmatrix} + r_{R,e(h)}^- e^{\mp i k_{e(h)} x} \begin{pmatrix} \hat{\varphi}_{2e(1h)} \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \otimes \begin{pmatrix} u(v) \\ v(u) \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

donde $\hat{\varphi}_{i,e(h)}$ con $i = 1, 2$, corresponde a las funciones definidas en (3.1) cuando $e^{\pm i\alpha} \rightarrow e^{\pm i\alpha_{e(h)}^S}$ y $e^{\pm i\alpha_{e(h)}^S} = \hbar\nu_F (k_{e(h)}^S \pm iq) / (E_F^S \pm \Omega)$, definiendo el momentum transversal como $\hbar\nu_F k_{e(h)}^S = \sqrt{(E_F^S \pm \Omega)^2 - (\hbar\nu_F q)^2}$ con $\Omega = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$ y $u^2(v^2) = \frac{1}{2} (1 \pm \frac{\Omega}{E})$. Considerando las condiciones de frontera para la lámina superconductora con frontera “armchair” (i.e., continuidad en la

primera derivada de la función de onda en las fronteras), las amplitudes de reflexión son $r_L^\pm = 1(0)$ con $x_L = 0(\infty)$ y $r_R^\pm = 0(1)$ con $x_L = \infty(0)$. La función $\psi_{<}^{e(h)}$ describe una cuasipartícula tipo electrón (hueco) incidiendo en la frontera con energía $E > E_F^S (E < E_F^S)$ e índice de valle \pm , que es reflejado en el borde x_L como una cuasipartícula tipo electrón (hueco) con índice de valle \mp . La función de Green debe ser entonces una superposición de los posibles procesos de dispersión, considerando una lámina superconductora con $x_L = 0$ y $x_R = \infty$ la función de Green es

$$g_\phi^{S,arm}(x, x') = \frac{-i}{2\hbar\nu} \left\{ \frac{1}{\Omega} (E\hat{\tau}_0 + \Delta\hat{\tau}_x) \otimes [\hat{A}_e^S + \hat{A}_h^S] + \hat{\tau}_z \otimes [\hat{A}_e^S - \hat{A}_h^S] \right\}, \quad (3.22)$$

con

$$\begin{aligned} \hat{A}_{e(h)}^S &= f_e(h) \left(\hat{\sigma}_0 \cos^{-1} \alpha_{e(h)}^S + \hat{\sigma}_y \tan \alpha_{e(h)}^S \right) \pm i g_{e(h)} \hat{\sigma}_x \\ f_e(h) &= e^{\pm i k_{e(h)}^S |x' - x|} \cos [K(x' - x)] + r_{L,e(h)}^+ e^{\pm i k_{e(h)}^S (x' + x)} \cos [K(x' + x)] \\ g_{e(h)} &= \text{sgn}(x' - x) \sin [K(x' - x)] + r_{L,e(h)}^+ e^{\pm i k_{e(h)}^S (x' + x)} \sin [K(x' + x)] \end{aligned} \quad (3.23)$$

3.2.2. Frontera “zigzag”

Teniendo en cuenta que en la frontera “zigzag” el sistema puede ser descrito por uno de los dos puntos de Dirac, como se mostró para la lámina de grafeno (3.1.2), seleccionando \mathbf{K}^+ las funciones de onda para las cuasipartículas cumplen una ecuación de la forma

$$\begin{pmatrix} H_+ - E_F^S & \Delta \\ \Delta^* & -H_+ + E_F^S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_+^e \\ \phi_-^h \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_+^e \\ \phi_-^h \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Las funciones asintóticas que describen a la cuasipartícula tipo electrón o tipo hueco pueden escribirse como

$$\begin{aligned} \phi_{<}^{e(h)}(x) &= \left\{ e^{\mp i k_{e(h)}^S x} \hat{\varphi}_{2e(1h)} + r_{L,e(h)}^{A,B} e^{\pm i k_{e(h)}^S x} \hat{\varphi}_{1e(2h)} \right\} \otimes \begin{pmatrix} u(v) \\ v(u) \end{pmatrix}, \\ \phi_{>}^{e(h)}(x) &= \left\{ e^{\pm i k_{e(h)}^S x} \hat{\varphi}_{1e(2h)} + r_{R,e(h)}^{A,B} e^{\mp i k_{e(h)}^S x} \hat{\varphi}_{2e(1h)} \right\} \otimes \begin{pmatrix} u(v) \\ v(u) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

Para encontrar las amplitudes de reflexión es necesario aplicar las condiciones de frontera que dependen de los átomos de la subred, de tal manera que $r_L^{A(B)} = 1(0)$ con $x_L^{A(B)} = 0(\infty)$ y $r_R^{A(B)} = 0(1)$ con $x_R^{A(B)} = \infty(0)$. Por lo tanto la función de Green para la lámina semi - infinita de grafeno superconductor con frontera “zigzag” es

$$g_\psi^{S,zz} = \frac{-i}{2\hbar\nu} \left\{ \frac{1}{\Omega} (E\hat{\tau}_0 + \Delta\hat{\tau}_x) \otimes [\hat{Z}_e^S + \hat{Z}_h^S] + \hat{\tau}_z \otimes [\hat{Z}_e^S - \hat{Z}_h^S] \right\} \quad (3.26)$$

donde

$$\hat{Z}_{e(h)}^S = \frac{e^{\pm i k_{e(h)}^S (x+x')}}{2 \cos \alpha_{e(h)}^S} e^{\mp i \alpha_{e(h)}^S} \hat{\varphi}_{1e(2h)} \hat{\varphi}_{2e(1h)}^\dagger + \frac{e^{\pm i k_{e(h)}^S |x' - x|}}{2 \cos \alpha_{e(h)}^S} \begin{cases} \varphi_{2e(1h)} \hat{\varphi}_{2e(1h)}^\dagger; & x < x', \\ \varphi_{1e(2h)} \hat{\varphi}_{1e(2h)}^\dagger; & x > x', \end{cases} \quad (3.27)$$

y $\tau_{x,y,z}$ y τ_0 representan las matrices de Pauli en el espacio de Nambu.

3.3. Propiedades de transporte

Considerando una interfase grafeno - superconductor donde el grafeno se extiende desde $x_L = -\infty$ hasta $x_R = 0$ y el superconductor desde $x_L = 0$ hasta $x_R = \infty$, entre las dos regiones existe un acople que se modela por un parámetro “hopping” t , el cual puede dar cuenta de un acople no ideal que puede relacionarse con la fortaleza de una barrera aislante, de tal manera que el sistema puede ser considerado como una juntura *GIS*. La geometría de la juntura se ilustra en la fig. 3.2.

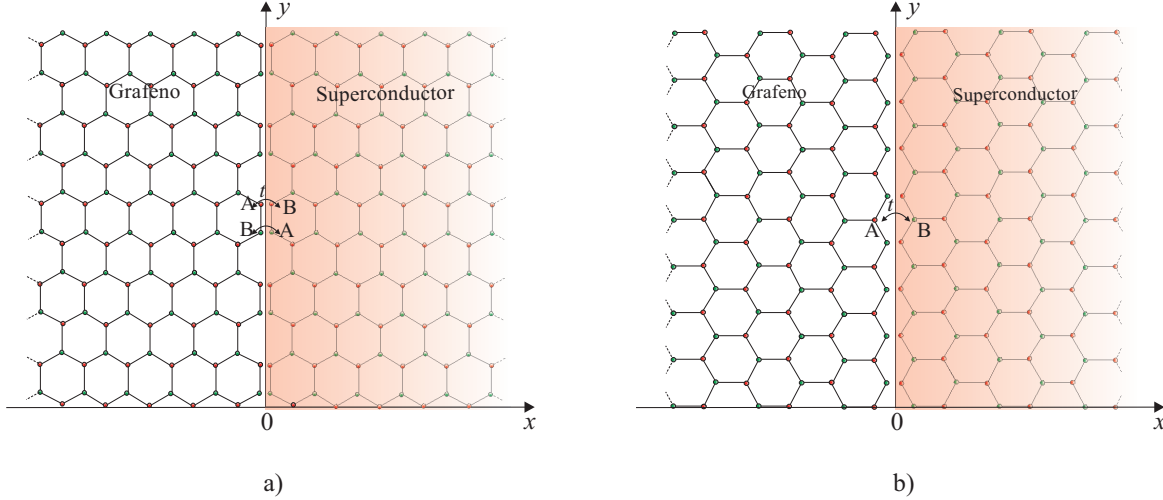


Fig. 3.2. Estructura Grafeno - Superconductor. El grafeno en el estado normal se extiende desde $x_L = -\infty$ a $x_R = 0$ y el grafeno al cual se le induce superconductividad depositando un superconductor, se extiende desde $x_L = 0$ a $x_R = \infty$. a) Frontera “armchair”, los átomos de las dos subredes se encuentran en la frontera. b) Frontera “zigzag”, los átomos de una de las subred $A(B)$ de la región izquierda se acoplan con los átomos $B(A)$ de la región derecha.

Para estudiar este tipo de sistemas utilizamos el método de aproximación hamiltoniana que ya describimos en (1.3.5), el cual se ha aplicado para el caso de una juntura metal normal - superconductor como puede verse en [83]. Para las junturas con base en grafeno se usa el método desarrollado en [140] para calcular las funciones de Green que involucran interfase *GS*, el cual se extiende para calcular corriente eléctrica, esto nos permite identificar los efectos de las diferentes fronteras sobre las propiedades de transporte en junturas *GS* y *GIS*. Como se verá más adelante la aplicación de esta aproximación describe propiedades de las junturas *GS* que se han descrito en otras publicaciones utilizando otros métodos [60, 63] para fronteras “zigzag” únicamente.

A continuación se encuentran las propiedades de transporte del sistema *GS* dependiendo del tipo de frontera, a partir de las funciones de Green del sistema acoplado. Esto considerando que la mezcla o no de los valles en el grafeno determina la forma en la que se realiza el acople en la interfase.

3.3.1. Modelo hamiltoniano para interfases grafeno superconductor

A continuación se describe la aproximación hamiltoniana para la interfase *GS* con diferentes fronteras. Para describir la juntura se escribe un hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = \hat{H}_L + \hat{H}_R + \hat{H}_{LR} - \mu_L \hat{N}_L - \mu_R \hat{N}_R, \quad (3.28)$$

donde \hat{H}_L y \hat{H}_R son los hamiltonianos sin perturbar que describen a los electrones a la izquierda L y a la derecha R de la interfase y que representan el grafeno y el superconductor respectivamente, \hat{H}_{LR} es el hamiltoniano que acopla las dos regiones, el cual puede ser escrito como

$$\hat{H}_{LR} = \sum_{\sigma} \left(t_1 \hat{c}_{L,A,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{R,B,\sigma}(\tau) + t_1^* \hat{c}_{R,B,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{L,A,\sigma}(\tau) + t_2 \hat{c}_{L,B,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{R,A,\sigma}(\tau) \right. \quad (3.29)$$

$$\left. + t_2^* \hat{c}_{R,A,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{L,B,\sigma}(\tau) \right), \quad (3.30)$$

donde en este caso $t_{1(2)}$ representan el acople o “hopping” entre los sitios de las región L y R , por ejemplo t_1 representa el acople entre el sitio A de la región L y el sitio B de la región R y $\hat{N}_{L(R)}$ es el operador número al lado $L(R)$ de la interfase, definido como

$$\hat{N}_L = \sum_{\sigma,i} \hat{c}_{L,i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{L,i,\sigma} \text{ y } \hat{N}_R = \sum_{\sigma,i} \hat{c}_{R,i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{R,i,\sigma}, \quad (3.31)$$

con $i = A, B$. Cuando se considera que la región L se encuentra a un voltaje V y la región R a un voltaje cero, $eV = \mu_L - \mu_R$, los operadores de destrucción pueden escribirse entonces como

$$\hat{c}_{L,i,\sigma}(\tau) = e^{-i(E+eV)t/\hbar} \hat{c}_{L,i,\sigma} \text{ y } \hat{c}_{R,i,\sigma}(\tau) = e^{-iEt/\hbar} \hat{c}_{R,i,\sigma}.$$

En este caso la corriente promedio se define como

$$I(\tau) = -e \left\langle \frac{d}{dt} \hat{N}_L(\tau) \right\rangle \quad (3.32)$$

$$= \frac{ie}{h} \sum_{\sigma} \left(t_1 \left\langle \hat{c}_{L,A,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{R,B,\sigma}(\tau) \right\rangle - t_1^* \left\langle \hat{c}_{R,B,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{L,A,\sigma}(\tau) \right\rangle \right. \quad (3.33)$$

$$\left. + t_2 \left\langle \hat{c}_{L,B,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{R,A,\sigma}(\tau) \right\rangle - t_2^* \left\langle \hat{c}_{R,A,\sigma}^{\dagger}(\tau) \hat{c}_{L,B,\sigma}(\tau) \right\rangle \right). \quad (3.34)$$

Para escribir la corriente en términos de las funciones de Green de Keldysh $G_{ij}^{+,-}$, se define el siguiente operador espinorial en la notación de Nambu

$$\hat{C}_i(\tau) = \begin{pmatrix} \hat{c}_{i,A,\uparrow}(\tau) \\ \hat{c}_{i,B,\uparrow}(\tau) \\ \hat{c}_{i,A,\downarrow}^{\dagger}(\tau) \\ \hat{c}_{i,B,\downarrow}^{\dagger}(\tau) \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_i^{\dagger}(\tau) = \left(\hat{c}_{i,A,\uparrow}^{\dagger}(\tau), \hat{c}_{i,B,\uparrow}^{\dagger}(\tau), \hat{c}_{i,A,\downarrow}(\tau), \hat{c}_{i,B,\downarrow}(\tau) \right), \quad (3.35)$$

donde se tienen en cuenta las subredes en la estructura del grafeno. Las funciones de Green de Keldysh se definen como en (1.84) y la corriente es

$$I(E) = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Tr} \tau_z \left[\tilde{t} G_{R,L}^{+,-}(E) - \tilde{t}^* G_{L,R}^{+,-}(E) \right]. \quad (3.36)$$

Para determinar la matriz de acople \tilde{t} se deben tener en cuenta las fronteras de la interfase, cuando se considera una interfase con frontera “armchair” $t_1 = t_2 = t$, esto teniendo en cuenta que el acople entre el sitio A de la región $L(R)$ y el sitio B de la región $R(L)$ es igual al que existe entre el sitio B de la región $L(R)$ y el sitio A de la región $R(L)$. Para una interfase con frontera “zigzag” solo dos sitios pertenecientes a diferentes subredes de cada región son acoplados como se muestra en fig. 3.2, en este caso considerando un acople entre sitios A de la región L y sitios B de la región R , el acople $t_2 = 0$.

Fronteras tipo “armchair”

Para fronteras tipo “armchair” la matriz de acople es

$$\tilde{t} = t\tau_x = t \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_x & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_x \end{pmatrix} \text{ y } \tau_z = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

donde $\hat{\sigma}_x$ es la matriz de Pauli. Utilizando la ecuación de Dyson (1.67) y la relación entre las funciones de Green de Keldysh y las funciones retardada y avanzada (1.76) como se observa en el apéndice E, la corriente es

$$I(E) = 8\pi^2 \frac{e}{h} (I_1(E) + I_2(E) + I_3(E) + I_A(E)) \quad (3.38)$$

donde

$$I_1(E) = t^2 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^r(E) \right) \bar{\rho}_{Re} \left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \right. \right. \\ \left. \left. \bar{\rho}_{Le} \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right] \quad (3.39)$$

$$I_2(E) = -t^3 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\bar{\rho}_{Le} \left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^r(E) \right) \bar{\rho}_{Reh} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \bar{\rho}_{Rhe} \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right] \quad (3.40)$$

$$I_3(E) = t^4 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \bar{\rho}_{Rh} \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right] \quad (3.41)$$

$$I_A(E) = t^4 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RR,eh}^{r*}(E) \bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{RR,eh}^r(E) \bar{\rho}_{Lh} + \hat{G}_{RR,he}^{r*}(E) \bar{\rho}_{Lh} \right. \right. \\ \left. \left. \hat{G}_{RR,he}^r(E) \hat{t} \bar{\rho}_{Le} \right) \hat{f}_{L,e}(E) \right] \quad (3.42)$$

con

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_{Le(h)} &= \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,ee(hh)}(E) \hat{\sigma}_x \\ \bar{\rho}_{R,e(h)} &= \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{RR,ee(hh)}(E) \hat{\sigma}_x \\ \bar{\rho}_{R,eh(he)} &= \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{RR,eh(he)}(E) \hat{\sigma}_x \end{aligned}$$

y las funciones de Fermi son definidas como

$$f(E) = f(E)\hat{I}, f_{L,e}(E) = f(E - eV)\hat{I} \text{ y } f_{L,h}(E) = f(E + eV)\hat{I}. \quad (3.43)$$

Cada componente de la corriente (3.38), describe un proceso de dispersión de los electrones que inciden sobre la interfase. $I_1(E)$ corresponde a la transferencia de electrones como electrones entre el grafeno en el estado normal y el grafeno en estado superconductor, las cuales se representan por $\rho_{LL,ee}(E)$, y $\rho_{RR,ee}(E)$. $I_2(E)$ corresponde a la transferencia de electrones representados por $\rho_{LL,ee}(E)$, a través de la aniquilación o creación de pares de Cooper representados por $\rho_{RR,eh}(E)$ y $\rho_{RR,he}(E)$. $I_3(E)$ surge de procesos que involucran electrones representados por $\rho_{LL,ee}$, en el grafeno normal transferidos al grafeno superconductor como huecos representados por $\rho_{RR,hh}$ como estado intermedio. En resumen los tres primeros términos corresponden a la transferencia de electrones desde el grafeno en estado normal a quasipartículas en el superconductor, mientras el término $I_A(E)$ representa las reflexiones de Andreev donde un electrón asociado a la densidad $\rho_{LL,ee}$ es reflejado como un hueco asociado a la densidad $\rho_{LL,hh}$, creando un par de Cooper en el superconductor.

La corriente (3.38) y las ecuaciones (3.39) - (3.42) generalizan los resultados para la corriente eléctrica de junturas NS , al caso de junturas con base en grafeno las cuales introducen una estructura matricial debida a la existencia de sitios A y B que no se presenta en un metal normal. Estos resultados reproducen los encontrados en [83], cuando se consideran las funciones de Green y las densidades de estados como escalares y $\hat{\sigma}_x = 1$.

Las densidades de estados $\rho_{LL}(E)$ y $\rho_{RR}(E)$ están relacionadas con las funciones de Green en equilibrio del sistema desacoplado y son definidas de la forma

$$\rho(E) = \frac{i}{2\pi} (g - g^{*T}), \quad (3.44)$$

con g una matriz que representa la función de Green de la región izquierda, con fronteras $x_L = -\infty$ y $x_R = 0$, que corresponde a un grafeno semi - infinito o a la region derecha con fronteras $x_L = 0$ y $x_R = \infty$, definidas según (3.11) y (3.22) respectivamente y que al ser evaluadas en la interfase pueden ser escritas como

$$g(0^-, 0^-) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{LL,ee} & 0 \\ 0 & \hat{g}_{LL,hh} \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

con

$$\hat{g}_{LL,ee} = \frac{-2i}{\hbar\nu} \begin{pmatrix} \cos^{-1} \alpha_{e(h)} & -i \tan \alpha_{e(h)} \\ i \tan \alpha_{e(h)} & \cos^{-1} \alpha_{e(h)} \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

y

$$g(0^+, 0^+) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{RR,ee} & \hat{g}_{RR,eh} \\ \hat{g}_{RR,he} & \hat{g}_{RR,hh} \end{pmatrix}, \quad (3.47)$$

con

$$\hat{g}_{RR,ee(hh)} = \frac{-i}{\hbar\nu} \begin{pmatrix} \frac{E}{\Omega} h_1 \pm h_2 & -i \left(\frac{E}{\Omega} l_1 \pm l_2 \right) \\ i \left(\frac{E}{\Omega} l_1 \pm l_2 \right) & \frac{E}{\Omega} h_1 \pm h_2 \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

$$\hat{g}_{RR,eh(he)} = \frac{-i}{\hbar\nu} \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{\Omega} h_1 & -i \frac{\Delta}{\Omega} l_1 \\ i \frac{\Delta}{\Omega} l_1 & \frac{\Delta}{\Omega} h_1 \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

donde

$$l_{1,2} = \tan \alpha_e^S \pm \tan \alpha_h^S, \quad (3.50)$$

$$h_{1,2} = \cos^{-1} \alpha_e^S \pm \cos^{-1} \alpha_h^S. \quad (3.51)$$

Las funciones de Green \hat{G}_{RR}^r y \hat{G}_{RL}^r , que representan las funciones de Green fuera del equilibrio en la región derecha de la interfase y aquella que relaciona las regiones derecha e izquierda, se encuentran a partir de las ecuaciones de Dyson descrita en (C.5) y (C.10) del apéndice C, las cuales pueden ser escritas en la interfase según fig 3.3 y considerando que $\tilde{\Sigma}_{LR} = \tilde{\Sigma}_{RL} = t\tau_x$ como

$$G_{RR}^{arm} = g(0^+, 0^+) + t^2 g(0^+, 0^+) \tau_x M_R^{arm} \tau_x g(0^+, 0^+), \quad (3.52)$$

$$G_{RL}^{arm} = t g(0^+, 0^+) \tau_x M_R^{arm}, \quad (3.53)$$

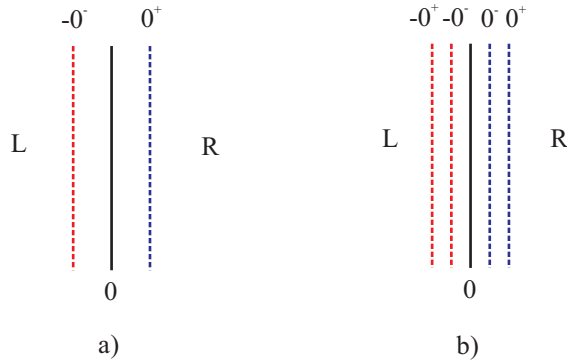


Fig. 3.3. a) Diagrama que distingue las funciones de Green del lado derecho e izquierdo de la interfase para la frontera “armchair”, en este caso $x = x' = 0^+$ o $x = x' = 0^-$ para derecha e izquierda respectivamente. b) Diagrama que distingue las funciones de Green del lado derecho e izquierdo de la interfase para la frontera “zigzag”, en este caso $x > x'$ o $x < x'$, con $(0^-, 0^+)$ en la derecha y $(-0^+, -0^-)$ en la izquierda.

con

$$M_R^{arm} = \left(g^{-1}(0^-, 0^-) - \tilde{\Sigma}_{LR} g(0^+, 0^+) \tilde{\Sigma}_{RL} \right)^{-1}. \quad (3.54)$$

Escribiendo de forma matricial en el espacio de Nambu las ecuaciones (3.52) y (3.53) se encuentran las funciones de Green que se involucran en la corriente como

$$G_{RR}^{arm} = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RR,ee}^r & \hat{G}_{RR,eh}^r \\ \hat{G}_{RR,he}^r & \hat{G}_{RR,hh}^r \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

y

$$G_{RL}^{arm} = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RL,ee}^r & \hat{G}_{RL,eh}^r \\ \hat{G}_{RL,he}^r & \hat{G}_{RL,hh}^r \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

A partir de la expresión para la corriente es posible encontrar la conductancia diferencial $\sigma = \frac{\partial I}{\partial V}$ usando las propiedades de las funciones de Green y las densidades de estados

$$\hat{G}_{ij,eh}^r(-E) = \hat{G}_{ij,he}^{r*}(E), \quad \hat{G}_{ij,ee}^r(-E) = -\hat{G}_{ij,hh}^{r*}(E), \quad (3.57)$$

$$\hat{\rho}_{ii,ee}(E) = \hat{\rho}_{ii,hh}(-E), \quad \hat{\rho}_{ii,eh}(E) = \hat{\rho}_{ii,he}^*(E) = -\hat{\rho}_{ii,he}^*(-E), \quad (3.58)$$

como se ve en el apéndice E, la conductancia diferencial a $T = 0$ K es

$$\sigma^{arm}(V) = 8\pi^2 \frac{e^2}{h} (\sigma_1(V) + \sigma_2(V) + \sigma_3(V) + \sigma_A(V)) \quad (3.59)$$

con

$$\sigma_1^{arm}(V) = t^2 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^r(eV) \right) \bar{\rho}_{R,e} \left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) \right) \bar{\rho}_{Le} \right) \right], \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} \sigma_2^{arm}(V) = & -t^3 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^r(eV) \right) \bar{\rho}_{R,eh} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \bar{\rho}_{Le} \right. \right. \\ & \left. \left. + \left(\hat{\sigma}_x + t\hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) \right) \bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \bar{\rho}_{Rhe} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.61)$$

$$\sigma_3^{arm}(V) = t^4 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \bar{\rho}_{Rh} \right) \right], \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned} \sigma_A^{arm}(V) = & t^4 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RR,eh}^{r*}(eV) \bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{RR,eh}^r(eV) \bar{\rho}_{Lh} \right. \right. \\ & \left. \left. + \hat{G}_{RR,he}^{r*}(eV) \bar{\rho}_{Lh} \hat{G}_{RR,he}^r(eV) \bar{\rho}_{Le} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.63)$$

En este caso el parámetro de acople t se puede normalizar de la forma

$$\bar{t} = \frac{t}{2\hbar v} \equiv t$$

toma valores entre 0 y 1 y puede ser considerada como proporcional a la transparencia de una barrera aislante entre las regiones G y S , donde $t = 0$ representa el límite túnel y $t = 1$ la transparencia perfecta; éste parámetro también aparece cuando se encuentran las funciones de Green perturbadas.

Fronteras tipo “zigzag”

Para frontera “zigzag” teniendo en cuenta que se acopla la subred A de la región izquierda con la subred B de la derecha el tipo de acople es

$$\tilde{t} = t\tau_1 = t \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 \end{pmatrix} \text{ y } \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Utilizando la ecuación de Dyson (1.67) y la relación entre las funciones de Green de Keldysh y las funciones retardada y avanzada (1.76), como se observa en el apéndice (E), la corriente es

$$I(E) = 8\pi^2 \frac{e}{h} (I_1(E) + I_2(E) + I_3(E) + I_A(E)), \quad (3.65)$$

donde

$$I_1(E) = t^2 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{I} + t \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \sigma_1^T \right) \hat{\rho}_{RR,ee}^>(E) \left(\hat{I} + t \sigma_1 \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \right. \right. \\ \left. \left. \hat{\rho}_{Le}^< \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right], \quad (3.66)$$

$$I_2(E) = -t^3 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{I} + t \sigma_1 \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \hat{\rho}_{Le}^< \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \sigma_1^T \hat{\rho}_{RR,he}^>(E) \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\hat{I} + t \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \sigma_1^T \right) \hat{\rho}_{RR,eh}^>(E) \sigma_1 \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{\rho}_{Le}^< \right) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) \right], \quad (3.67)$$

$$I_3(E) = t^4 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{\rho}_{Le}^< \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \sigma_1^T \hat{\rho}_{RR,hh}^>(E) \sigma_1 \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right], \quad (3.68)$$

$$I_A(E) = t^4 \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RR,eh}^{>r*}(E) \hat{\rho}_{Le}^< \hat{G}_{RR,eh}^{>r}(E) \hat{\rho}_{Lh}^< \right. \right. \\ \left. \left. + \hat{G}_{RR,he}^{>r*}(E) \hat{\rho}_{Lh}^< \hat{G}_{RR,he}^{>r}(E) \hat{\rho}_{Le}^< \right) \hat{f}_{LL,ee}(E) \right], \quad (3.69)$$

con

$$\hat{\rho}_{Le(h)}^< = \sigma_1 \hat{\rho}_{LL,ee(hh)}^< (E) \sigma_1^T, \quad (3.70)$$

donde el superíndice $>$ o $<$ representan las funciones de Green para $x > x'$ y $x < x'$. La interpretación de los términos de la corriente es independiente de la frontera, aun cuando para la frontera “zigzag” el acople de derecha a izquierda es diferente del de izquierda a derecha y por esta razón aparecen los términos σ_1 y σ_1^T .

Las densidades de estados $\rho_{LL}(E)$ y $\rho_{RR}(E)$ se definen en la ecuación (3.44) utilizando las funciones de Green no acopladas en la región izquierda y derecha (3.15) y (3.26) respectivamente, las cuales al ser evaluadas en la frontera pueden ser escritas como

$$g^<(-0^+, -0^-) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{LLee}^< & 0 \\ 0 & \hat{g}_{LLhh}^< \end{pmatrix}, \quad (3.71)$$

con

$$\hat{g}_{LLee(hh)}^< = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & \mp 1 \\ 0 & e^{\mp i\alpha_e(h)} \end{pmatrix}, \quad (3.72)$$

y

$$g^>(0^+, 0^-) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{RRee} & \hat{g}_{RReh} \\ \hat{g}_{RRhe} & \hat{g}_{RRhh} \end{pmatrix}, \quad (3.73)$$

con

$$\hat{g}_{RRee(hh)} = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} \frac{E}{\Omega} E_1 \pm E_2 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{g}_{RReh(he)} = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.74)$$

donde

$$E_1 = \frac{(e^{-i\alpha_e^S} + e^{i\alpha_h^S})}{2}, \quad E_2 = \frac{(e^{-i\alpha_e^S} - e^{i\alpha_h^S})}{2}. \quad (3.75)$$

Las funciones de Green $\hat{G}_{RRee(hh)}^{r>}$, $\hat{G}_{RReh(he)}^{r>}$, $\hat{G}_{RLee(hh)}^r$ y $\hat{G}_{RLeh(he)}^r$ son matrices 2×2 que se encuentran escribiendo las funciones de Green perturbadas G_{RR}^{zz} y G_{RL}^{zz} en el espacio de Nambu, donde se ha tenido en cuenta que para frontera “zigzag” las funciones de onda que describen el sistema cumplen con una ecuación de Dirac por lo que en la interfase la función no es continua y las funciones de Green tienen $x \neq x'$. Los detalles del cálculo de las funciones de Green perturbadas se encuentran en el apéndice C y pueden ser escritas a partir de las ecuaciones (C.24) y (C.34) evaluadas en la interfase, donde es fundamental seguir la gráfica 3.3, para construir apropiadamente la función de Green acoplada como

$$G_{RR}^{zz>} = g^{>}(0^+, 0^-) + t^2 g^{>}(0^+, 0^-) \tau_1 M_R^{zz} g^{<}(-0^+, -0^-) \tau_1^T g^{>}(0^+, 0^-), \quad (3.76)$$

$$G_{RL}^{zz} = t g^{>}(0^+, 0^-) \tau_1 M_R^{zz} g^{<}(-0^+, -0^-), \quad (3.77)$$

donde

$$M_R^{zz} = [I - g^{<}(-0^+, -0^-) \tilde{\Sigma}_{LR} g^{>}(0^+, 0^-) \tilde{\Sigma}_{RL}]^{-1}, \quad (3.78)$$

y se ha tenido en cuenta que $\tilde{\Sigma}_{RL} = t\tau_1$ y $\tilde{\Sigma}_{LR} = t\tau_1^T$.

La variación de la corriente con respecto al voltaje permite encontrar la conductancia diferencial para interfases con fronteras “zigzag” como

$$\sigma^{zz}(V) = 8\pi^2 \frac{e^2}{h} (\sigma_1(V) + \sigma_2(V) + \sigma_3(V) + \sigma_A(V)), \quad (3.79)$$

con

$$\sigma_1^{zz}(V) = t^2 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{I} + t\hat{G}_{RL,ee}^r(E) \sigma_1^T \right) \hat{\rho}_{RR,ee}^{>}(E) \left(\hat{I} + t\sigma_1 \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \hat{\rho}_{Le}^{<} \right) \right], \quad (3.80)$$

$$\begin{aligned} \sigma_2^{zz}(V) = & -t^3 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{I} + t\sigma_1 \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \hat{\rho}_{Le}^{<} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \sigma_1^T \hat{\rho}_{RR,he}^{>}(E) \right. \right. \\ & \left. \left. + \left(\hat{I} + t\hat{G}_{RL,ee}^r(E) \sigma_1^T \right) \hat{\rho}_{RR,eh}^{>}(E) \sigma_1 \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{\rho}_{Le}^{<} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.81)$$

$$\sigma_3^{zz}(V) = t^4 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{\rho}_{Le}^{<} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \sigma_1^T \hat{\rho}_{RR,hh}^{>}(E) \sigma_1 \right) \right], \quad (3.82)$$

$$\begin{aligned} \sigma_A^{zz}(V) = & t^4 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{G}_{RR,eh}^{>r*}(E) \hat{\rho}_{Le}^{<} \hat{G}_{RR,eh}^{>r}(E) \hat{\rho}_{Lh}^{<} \right. \right. \\ & \left. \left. + \hat{G}_{RR,he}^{>r*}(E) \hat{\rho}_{Lh}^{<} \hat{G}_{RR,he}^{>r}(E) \hat{\rho}_{Le}^{<} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.83)$$

El término t para este tipo de frontera se relaciona con un parámetro de acople normalizado definido como

$$\bar{t} = \frac{t}{\hbar v} \equiv t,$$

que solo se diferencia con el que se definió para el caso de frontera “armchair” en $1/2$ y tiene el mismo significado; éste parámetro aparece cuando se calculan las funciones de Green como se ve en el apéndice C, en adelante se utiliza este parámetro de acople normalizado a 1.

Con ayuda de la expresión para la corriente en un sistema GS (3.65) es posible encontrar la corriente para una juntura GG . En este caso se tienen en cuenta únicamente el transporte electrónico, por lo que de los términos de la corriente (3.65) el único diferente de cero es $I_1(E)$ y es necesario encontrar las funciones de Green \hat{G}_{RLee}^r de (3.77) considerando $\Delta = 0$, la cual es

$$\hat{G}_{RLee}^r = -t \frac{1}{(1 + P^2 e^{-2i\alpha_e^G})} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha_e^G} & e^{-2i\alpha_e^G} \\ 1 & e^{-i\alpha_e^G} \end{pmatrix}, \quad (3.84)$$

por lo que la corriente para la juntura GG puede ser escrita como

$$I_{gg}(E) = 2 \frac{e}{h} \int dE T(E) (f_{LL,ee}(E) - f(E)), \quad (3.85)$$

donde $T(E, V)$ es el coeficiente de transmisión, dado por

$$T(E) = \sum_q \text{Re} \left(\left| \frac{2t \cos \alpha_e^G}{e^{-2i\alpha_e^G} t^2 + 1} \right|^2 \right). \quad (3.86)$$

La conductancia diferencial a $T = 0$ es entonces

$$\sigma_{gg}(eV) = 2 \frac{e^2}{h} T(eV), \quad (3.87)$$

cuando $\alpha_e^G = 0$ la transmisión es

$$T(E) = \frac{4t^2}{(t^2 + 1)^2}, \quad (3.88)$$

la cual coincide con la transmisión encontrada para una juntura NN .

3.3.2. Conductancia diferencial en junturas grafeno - superconductor

Con base en las expresiones encontradas para la conductancia diferencial para diferentes fronteras (3.59) y (3.79), se encuentra la conductancia diferencial cuando se considera transparencia perfecta entre el grafeno y el superconductor y diferentes valores de dopaje del grafeno. Los resultados se observan en la fig 3.4 y se han normalizado¹ con respecto a la conductancia de una lámina de grafeno $\sigma_0 = \frac{4e^2}{h} \rho_0$, con ρ_0 la densidad de estados de la lámina definida como $\rho_0 = \frac{(E+E_{FG})}{\pi \hbar v}$.

¹Cuando se considera frontera “zigzag”, la normalización de la conductancia debe estar acompañada de un 2 que se adiciona para tomar en cuenta los dos valles.

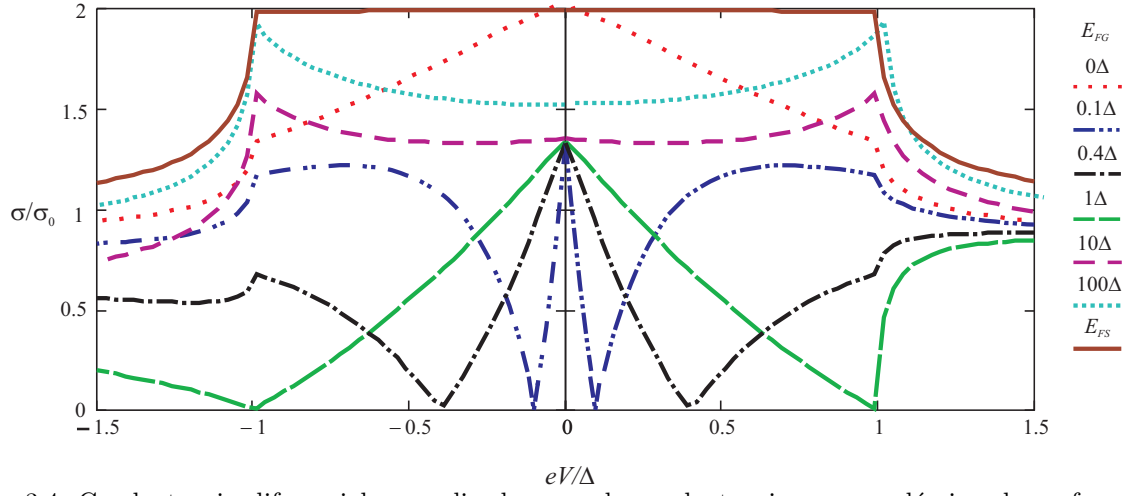


Fig. 3.4. Conductancia diferencial normalizada a σ_0 , la conductancia para una lámina de grafeno, en función del voltaje aplicado para una juntura GS para frontera “armchair” y “zigzag”, considerando diferentes dopajes del grafeno los cuales se representan a través de su energía de Fermi E_{FG} , con $E_{FS} = 300\Delta$ y $t = 1$.

En este caso se distinguen dos comportamientos diferenciados dependiendo del dopaje, el primero para $E_{FG} \leq \Delta$ donde la conductancia diferencial disminuye hasta anularse cuando $eV = E_{FG}$, aumentando posteriormente hasta $eV = \Delta$ y otra con $E_{FG} > \Delta$ para la cual la conductancia diferencial presenta un máximo cuando $eV = \Delta$ y no hay puntos donde se anule; éste resultado es similar para los dos tipos de frontera.

Para entender mejor el comportamiento de la conductancia diferencial encontramos el coeficiente de reflexión electrón - hueco o coeficiente de Andreev R_A , y el coeficiente de reflexión electrón - electrón R_{ee} . Para ello partimos de la derivada con respecto al voltaje de la corriente definida en (1.14), con la que la conductancia puede ser escrita a partir de estos coeficientes de la forma

$$\frac{\sigma}{\sigma_0} = 2\pi\hbar v [1 + R_A(eV) - R_{ee}(eV)], \quad (3.89)$$

donde los coeficientes $R_{A(ee)}(eV) = \sum_q R_{A(ee)}(eV, q)$ [121]. El coeficiente R_A puede encontrarse a partir de la componente de la conductancia diferencial relacionada con las reflexiones de Andreev, σ_A la cual es descrita para fronteras “armchair” y “zigzag” por (3.63) y (3.83) respectivamente. El coeficiente es entonces

$$\frac{\sigma_A}{\sigma_0} = 2\pi\hbar v R_A(eV), \quad (3.90)$$

el cual puede escribirse para frontera “armchair” como

$$R_A^{arm}(eV) = \frac{\pi}{\hbar v \rho_0} t^4 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(G_{RR,eh}^{r*}(eV) \bar{\rho}_{Le} G_{RR,eh}^r(eV) \bar{\rho}_{Lh} + G_{RR,he}^{r*}(eV) \bar{\rho}_{Lh} G_{RR,he}^r(eV) \bar{\rho}_{Le} \right) \right], \quad (3.91)$$

y para frontera “zigzag”

$$R_A^{zz}(eV) = \frac{2\pi}{\hbar v \rho_0} t^4 \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{G}_{RR,eh}^{r>}(eV) \right)^* \bar{\rho}_{Le}^{<} G_{RR,eh}^{r>}(eV) \bar{\rho}_{Lh}^{<} + \left(G_{RR,he}^{r>}(eV) \right)^* \bar{\rho}_{Lh}^{<} G_{RR,he}^{r>}(eV) \bar{\rho}_{Le}^{<} \right) \right]. \quad (3.92)$$

Usando (3.89) es posible escribir también el coeficiente R_{ee} como

$$R_{ee}^\alpha(eV) = (1 + R_A^\alpha(eV)) - \frac{\sigma^\alpha}{2\pi\hbar v \sigma_0}, \quad (3.93)$$

donde α representa el tipo de frontera “armchair” y “zigzag”.

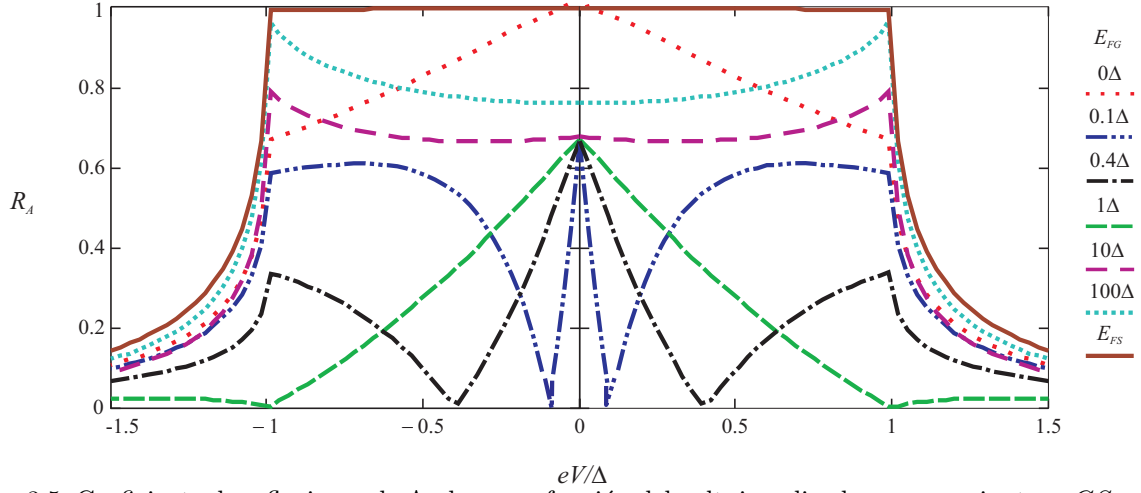


Fig. 3.5. Coeficiente de reflexiones de Andreev en función del voltaje aplicado para una junta GS para fronteras “armchair” y “zigzag”, considerando diferentes dopajes del grafeno y acople perfecto.

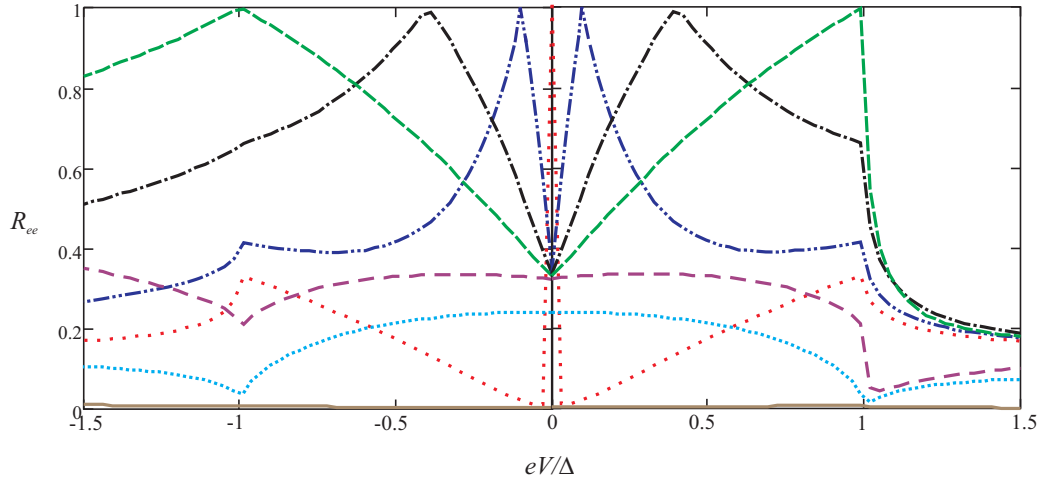


Fig. 3.6. Coeficiente de reflexión normal en función del voltaje aplicado para una junta GS para fronteras “armchair” y “zigzag”, considerando diferentes dopajes del grafeno y acople perfecto.

Los coeficientes R_A y R_{ee} para la junta GS se muestran en la fig. 3.5 y 3.6 respectivamente, donde se observa que el comportamiento de la conductancia diferencial depende directamente de la variación de estos coeficientes con respecto al voltaje aplicado.

Para describir el comportamiento de los coeficientes distinguimos dos rangos de dopajes para el grafeno $E_{FG} \leq \Delta$ y $E_{FG} > \Delta$. Cuando $E_{FG} \leq \Delta$ el efecto de la existencia del punto de Dirac en la densidad de estados del grafeno se hace fundamental para entender el comportamiento de los coeficientes de reflexión, debido a que en este rango de energía se presentan dos tipos de reflexiones de Andreev; la primera para $-E_{FG} < eV < E_{FG}$ llamada intrabanda o retroreflexión que se presenta para energías positivas y negativas, donde para energías positivas podemos visualizar los procesos de dispersión a partir de la incidencia de un electrón $R_A = R_{eh}$, mientras que para energías negativas como la incidencia de un hueco $R_A = R_{he}$, esto se muestra en la fig. 3.7.

El segundo tipo de reflexiones de Andreev se presenta cuando $E_{FG} < |eV| < \Delta$ y se denomina como interbanda o reflexión de Andreev especular (los diferentes tipos de reflexiones se describen en la sección 1.2.2); adicionalmente, cuando $|eV| = E_{FG}$ el electrón incidente es reflejado como hueco en el punto de Dirac lo cual anula R_A debido a que la densidad $\rho_h = 0$ en este punto, lo mismo ocurre cuando se considera la incidencia de un hueco ya que el electrón reflejado en el punto de Dirac tiene $\rho_e = 0$, esto puede verse en fig. 3.7.

Cuando R_{eh} o R_{he} son iguales a cero R_{ee} o R_{hh} (donde $R_{ee} = R_N$ cuando incide un electrón i.e., energías positivas y $R_{hh} = R_N$ representa la incidencia de un hueco i.e., energías negativas), toman el valor de uno anulando el transporte de carga, por lo tanto la conductancia diferencial es igual a cero en estos casos. A medida que el hueco reflejado se aleja del punto de Dirac, R_{eh} aumenta y de forma análoga sucede para R_{he} . El comportamiento inverso se presenta para R_{ee} o R_{hh} como se observa en la fig 3.8.

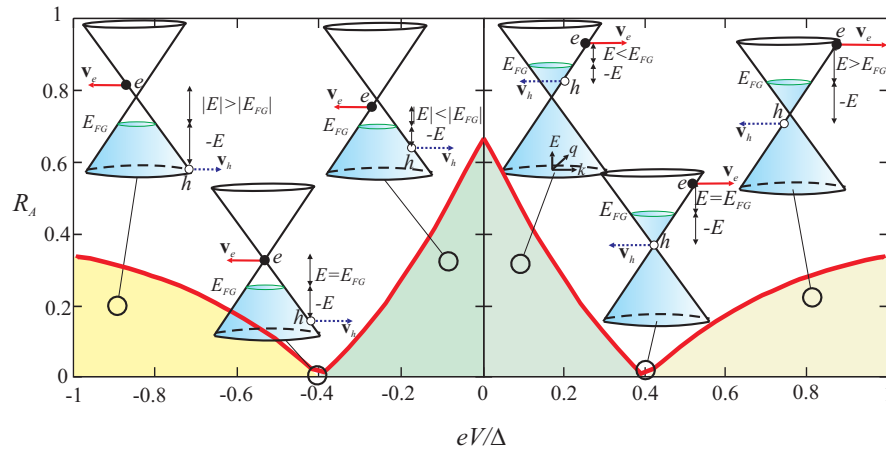


Fig. 3.7. Coeficiente de reflexiones de Andreev en función del voltaje aplicado para una juntura *GS* considerando un dopaje de $E_{FG} = 0,4\Delta$. En este caso se diferencian dos regiones $E < E_{FG}$, donde las reflexiones de Andreev que se presentan son de tipo especular y $E > E_{FG}$, donde las reflexiones presentes son retroreflexiones, estas regiones están separadas por un punto donde el coeficiente de reflexión de Andreev es nulo.

En el segundo rango correspondiente a dopajes altos $E_{FG} > \Delta$, los electrones o huecos incidentes son reflejados en la misma banda de energía por lo que solo se presentan retroreflexiones, las cuales son más probables que las dispersiones normales, debido a que R_A aumenta mientras R_N disminuye al aumentar eV , siendo máximo cuando $|eV| = \Delta$; cuando $E_{FG} = E_{FS}$ el comportamiento de los coeficientes corresponde al de la juntura *NS*, donde para $eV < \Delta$ el coeficiente $R_A = 1$ y por lo tanto $R_{ee} = 0$.

Para los dos rangos de dopaje las partículas que inciden desde el grafeno en estado normal

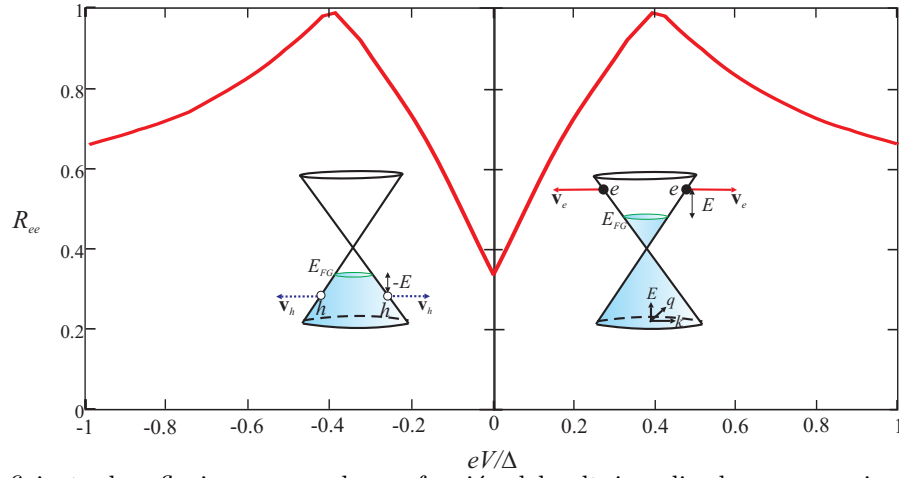


Fig. 3.8. Coeficiente de reflexiones normales en función del voltaje aplicado para una juntura GS considerando un dopaje de $E_{FG} = 0,4\Delta$. En este caso los electrones y los huecos se reflejan con la misma energía con la que incidieron, de tal manera que no se observan diferentes regiones como en el caso de R_A .

pueden ser transmitidas al superconductor como cuasipartículas y los coeficientes cumplen que $R_N + R_A + T = 1$, con T el coeficiente de transmisión; a medida que $|eV| \gg \Delta$ T tiende a uno y los coeficientes de reflexión R_A y R_N decaen; en este rango de energía la conductancia diferencial disminuye más rápidamente con el voltaje para la incidencia de huecos en comparación con la incidencia de electrones, esto puede entenderse al analizar la densidad de estados para los dopajes como $E_{FG} = 0,1\Delta$, $0,4\Delta$ y 1Δ , la densidad se muestra en la fig. 3.9, donde se observa que para $E_{FG} = 1\Delta$ la densidad de huecos es muy baja para energías negativas mayores a Δ lo cual se refleja en la conductancia, a medida que el dopaje tiende a cero la densidad de estados es más simétrica respecto al voltaje, así como la conductancia.

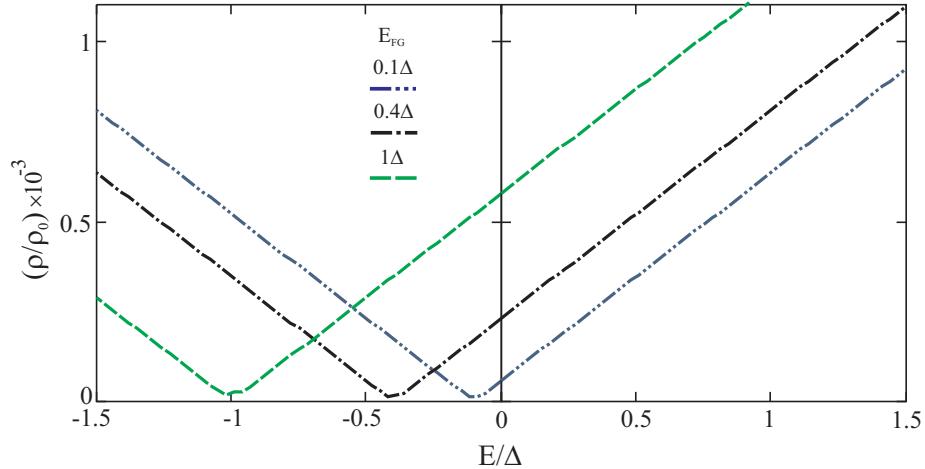


Fig. 3.9. Densidad de estados para la juntura GS en función de la energía, para diferentes dopajes E_{FG} .

El comportamiento de la conductancia diferencial y de las reflexiones de Andreev cuando se considera frontera tipo “zigzag” y acople perfecto ha sido analizado para voltajes positivos por otros autores [60, 63], cuyos resultados coinciden con los obtenidos en éste caso.

Como se mostró en la fig. 3.4 la conductancia diferencial $\sigma^{zz} = \sigma^{arm} = \sigma$, sin embargo cuando el acople entre las interfases no es perfecto, la conductancia diferencial para cada tipo presenta diferencias.

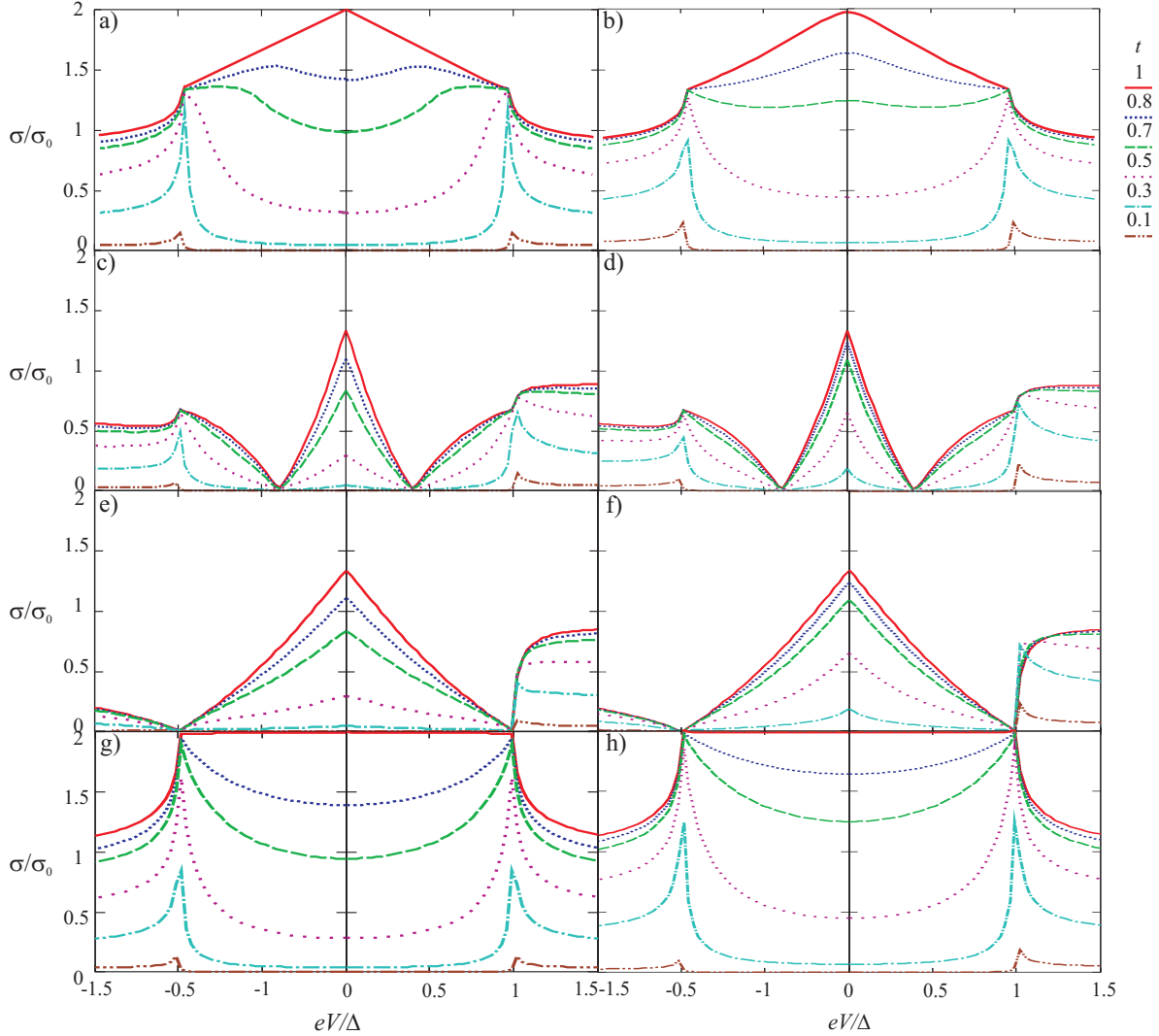


Fig. 3.10. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para diferentes valores de t . Los dopajes $E_{FG} = 0\Delta$, 0.4Δ , 1Δ y E_{FS} se representan en a), c), e) y g) para frontera “zigzag” y en b), d), f) y h) para frontera “armchair”.

La conductancia diferencial para diferentes dopajes E_{FG} y variando el parámetro de acople t se muestra en la fig. 3.10; se observa que la conductancia disminuye debido a que se reduce el acople entre el grafeno y el superconductor, esto ocurre independientemente del dopaje y del tipo de frontera. El comportamiento de la conductancia diferencial muestra que al disminuir t la conductancia diferencial para frontera “zigzag” es menor que para “armchair”, esto debido a que cuando $t \neq 1$ para la frontera “armchair” se abre un canal de dispersión adicional, debido al acople entre los valles, que no se presenta para la frontera “zigzag”, donde no hay dispersión de cuasipartículas entre los dos valles \mathbf{K} y \mathbf{K}' , ver fig. 3.11.

La conductancia diferencial para $E_{FG} = 0\Delta$ y E_{FS} se muestra en la fig. 3.10 a, b, g y h, donde

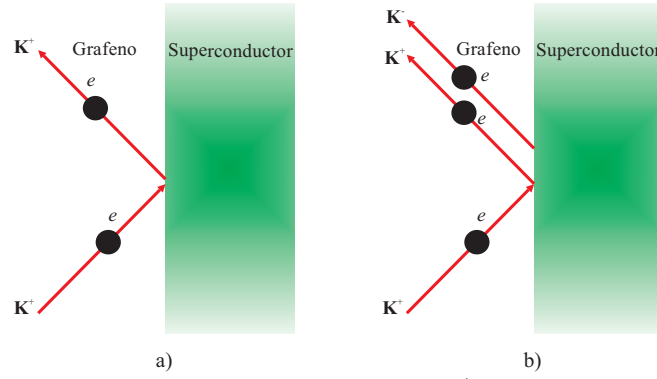


Fig. 3.11. Canales de dispersión para un electrón incidente, a) frontera “zigzag” donde solo existe un canal de dispersión \mathbf{K}^+ . b) frontera “armchair” donde los dos canales de dispersión \mathbf{K}^+ y \mathbf{K}^- son permitidos. Un comportamiento similar se presenta cuando se considera la incidencia de huecos.

se observa simetría con respecto al voltaje, dado que para estos dopajes los canales de dispersión para e y h son simétricos. Para el caso de $E_{FG} = 0\Delta$ se observa que la conductancia diferencial para la frontera “zigzag” presenta un mínimo para $eV = 0$ con $t = 0,7$ y $0,8$, mientras que para la frontera “armchair” para este valor de energía y t se presentan máximos debido al acople entre los valles para este tipo de frontera. Para $E_{FG} = 0,4\Delta$ y 1Δ , ver fig. 3.10 c, d, e y f, la conductancia diferencial es asimétrica con respecto al voltaje para $eV > \Delta$, lo cual indica que la transmisión de cuasipartículas al superconductor cuando se considera la incidencia de huecos es menor que cuando se consideran electrones; adicionalmente, para $E_{FG} = 1\Delta$ se presenta un máximo para $eV = \Delta$ en la conductancia para fronteras “armchair” y $t = 0,3$ y $0,5$ que no se observan para frontera “zigzag”.

Resultados similares a los encontrados variando la transparencia de la barrera y para voltajes positivos, considerando el caso de frontera tipo “armchair”, fueron hallados por [156] resolviendo las ecuaciones de BdGD para este tipo de junturas.

3.3.3. Juntura $p - n$

La juntura GS en este caso corresponde a una juntura nn donde tanto el grafeno como el superconductor están dopados con electrones, i.e., E_{FG} y E_{FS} son positivas; para una juntura pn el grafeno es dopado con huecos por lo que tiene una energía de Fermi negativa. En este caso la conductancia diferencial para diferentes dopajes cuando el acople no es perfecto se muestra en la fig. 3.12, donde se observa que para dopajes bajos fig. 3.12 a, b, c y d, el efecto del cambio de signo en el dopaje del grafeno corresponde a un cambio de eV por $-eV$ con respecto a los resultados para dopaje positivo, ver fig. 3.10 c, d, e y f.

Para dopajes altos el efecto es diferente, cuando consideramos que $E_{FG} = E_{FS}$, en el caso de una juntura $n - n$ se encontró que el comportamiento correspondía al de una juntura NS convencional, debido a que las energías de Fermi del grafeno y el superconductor son iguales y un electrón incidente desde el grafeno encuentra una barrera de potencial debida únicamente al potencial de pares; por otro lado, para la juntura $p - n$ el cambio de signo en el dopaje hace que la conductancia disminuya para $|eV| < \Delta$ presentando un máximo para $|eV| = \Delta$. Para una juntura $p - n$ la diferencia entre las energías de Fermi de la juntura $E_{FS} - E_{FG} = 2|E_{FS}|$ actúa como una barrera de potencial produce un aumento de las reflexiones normales respecto a las de Andreev, sin embargo, el hecho de que ocurra una resonancia en $|eV| = \Delta$ se debe a la

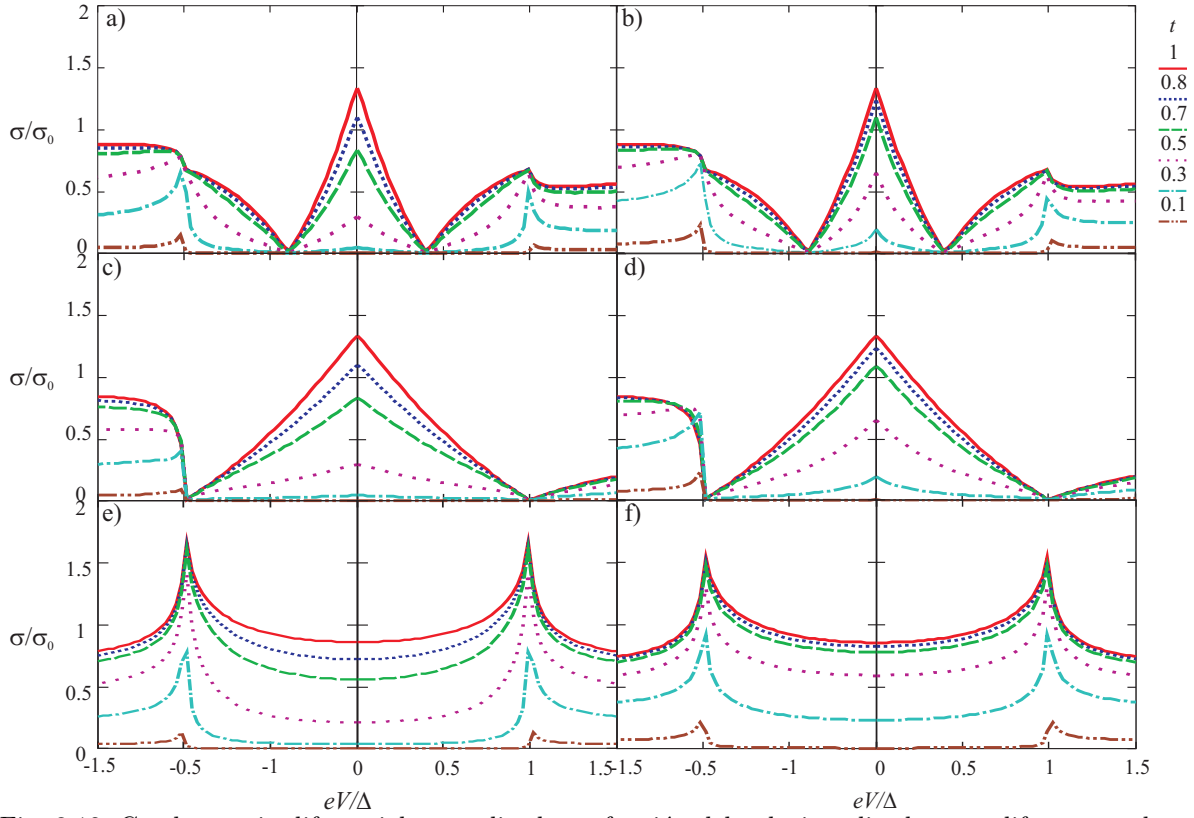


Fig. 3.12. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para diferentes valores de t . Los dopajes $E_{FG} = -0,4\Delta$, -1Δ y $-E_{FS}$ se representan en las fig. a), c) y e) para frontera “zigzag” y en b), d) y f) para frontera “armchair”.

paradoja de Klein, de lo contrario, en una juntura convencional los las reflexiones normales son aproximadamente 1. Teniendo en cuenta la diferencia entre la conductancia encontrada para las junturas nn y pn , este sistema sería una propuesta experimental para observar la paradoja de Klein en sistemas con grafenos a los que se les induce superconductividad.

Transporte eléctrico en una juntura grafeno - grafeno - superconductor

En este capítulo consideramos el sistema grafeno - grafeno - superconductor, donde la región intermedia corresponde a una película de grafeno G' de ancho W a la cual se acopla, a izquierda un grafeno semi - infinito G y a derecha un grafeno semi - infinito al que se le induce superconductividad S , por lo que se denomina juntura $GG'S$.

La introducción de la película de grafeno permite modificar las propiedades de transporte con respecto al sistema GS , debido a que ésta puede ser usada como un pozo o barrera de potencial. Cuando la película de grafeno se toma como pozo de potencial se presentan estados de energía cuasiligados en G' , los que han sido estudiados por algunos autores [71, 130]; cuando se toma como barrera de potencial es posible observar la denominada paradoja de Klein [67], para la que la transmisión de cuasipartículas a través de la barrera puede realizarse con probabilidad 1 en incidencia normal y que es de gran interés teórico en sistemas con base en grafeno, ya que este tipo de sistemas permiten realizar una demostración experimental de este efecto [68, 69]. Las propiedades de transporte para sistemas como $GIGS$ se han estudiado utilizando las soluciones de las ecuaciones de $BdGD$, considerando anchos de la barrera mucho menores que la longitud de coherencia, altos dopajes y bordes “zigzag” únicamente [61, 63, 64, 157], estos trabajos no exploran anchos de la película para los cuales el efecto de los estados cuasiligados es importante en el estudio de las propiedades de transporte. Análisis del efecto de la paradoja Klein sobre las propiedades de transporte en sistemas GIS se han realizado recientemente considerando frontera “zigzag” para dopajes positivos [156].

En este capítulo analizamos el transporte eléctrico en la juntura $GG'S$ utilizando el método de las funciones de Green para bajos y altos dopajes, considerando distintos anchos para la película de grafeno y bordes “zigzag” y “armchair” en las interfases. Inicialmente estudiamos la densidad de estados para la película de grafeno G' , que depende del tipo de fronteras y del ancho de la misma. Analizamos también la densidad de estados del sistema $GG'S$ variando el ancho de la película G' y el acople entre ésta, el superconductor S y el grafeno G , finalmente encontramos la corriente y la conductancia diferencial para el sistema $GG'S$, cuando se considera la película como una barrera o un pozo de potencial, encontrando comportamientos determinados por el tipo de frontera de las interfases del sistema.

4.1. Densidad de estados de la película de grafeno

El sistema $GG'S$ está formado por un grafeno semi - infinito que se extiende desde $x_L = -\infty$ y $x_R = -W$, acoplado a una película de grafeno de ancho W con fronteras $x_L = -W$ y $x_R = 0$, que a su vez se acopla a un grafeno semi - infinito al cual se le induce superconductividad y que se extiende desde $x_L = 0$ hasta $x_R = \infty$, como se muestra en la fig. 4.1.

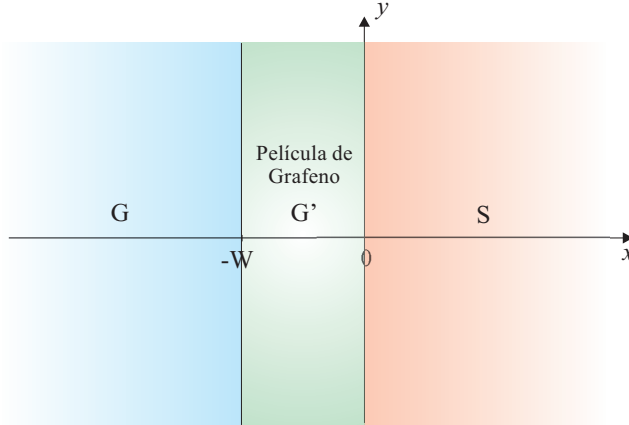


Fig. 4.1. Juntura $GG'S$. El grafeno en el estado normal se extiende desde $-\infty$ a $-W$, la película de grafeno se ubica entre $-W$ y 0 y el grafeno al cual se le induce superconductividad se extiende desde 0 a ∞ .

Teniendo en cuenta que la película G' determina el transporte entre G y S analizamos su densidad de estados, la cual se encuentra a partir de las funciones de Green para las estructuras de grafeno con fronteras “zigzag” y “armchair” estudiadas en el capítulo anterior, considerando ahora una película de grafeno con ancho W .

4.1.1. Frontera “armchair”

Para una película de grafeno con fronteras tipo “armchair” la función de Green se define en (3.11), donde dependiendo de la posición en x de la película los coeficientes r_R^\pm y r_L^\pm se determinan según (3.10), teniendo en cuenta que los bordes de la película se encuentran en $x_L = -W$ y $x_R = 0$ los coeficientes son

$$r_R^\pm = 1 \text{ y } r_L^\pm = e^{\pm 2i(K \pm k)W}, \quad (4.1)$$

y la función de Green para la película G' es

$$g_c^{arm}(x, x') = \frac{-i}{2\hbar\nu \cos \alpha} \left\{ \frac{\hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_1^\dagger}{(1 - e^{2i(K+k)W})} \left[e^{i(K+k)|x-x'|} + e^{-i(K+k)(|x-x'|-2W)} \right. \right. \\ \left. \left. + e^{i(K+k)(x+x'+2W)} + e^{-i(K+k)(x+x')} \right] + \frac{\hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_2^\dagger}{(1 - e^{-2i(K-k)W})} \left[e^{-i(K-k)|x-x'|} \right. \right. \\ \left. \left. + e^{i(K-k)(|x-x'|-2W)} + e^{-i(K-k)(x+x'+2W)} + e^{i(K-k)(x+x')} \right] \right\}, \quad (4.2)$$

con $\hat{\varphi}_1^\dagger = (e^{i\alpha/2}, e^{-i\alpha/2})$, $\hat{\varphi}_2^\dagger = (e^{-i\alpha/2}, -e^{i\alpha/2})$ y W el ancho de la región superconductora. Los estados de la película se encuentran a partir de los polos de la función de Green ($1 = e^{\pm 2i(K \pm k)W}$) y pueden ser observados en la densidad espectral que se muestra en la fig. 4.2¹, en estas gráficas las energías positivas representan la densidad de estados para electrones,

¹Las gráficas para la densidad espectral de la película de grafeno se normalizan según el valor del potencial de pares $\Delta = 0,001t$, que se tomará cuando se acople a ésta el superconductor, esto para poder comparar estas gráficas con las que encontraremos más adelante para la juntura $GG'S$

mientras que las energías negativas representan la densidad de estados para huecos. Se observa que la densidad espectral es simétrica con respecto al vector de onda q .

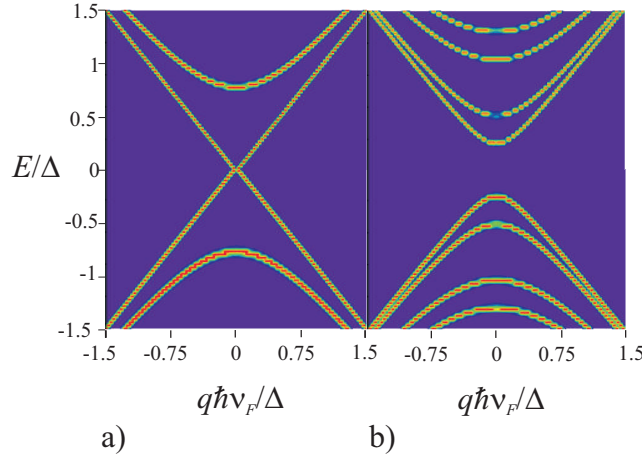


Fig. 4.2. Densidad de estados de la película G' con fronteras “armchair” para dos diferentes anchos de la película definidos como a) $W = 3m$ y b) $W = 3m + 1$, con m entero. El ancho de la película es $W = 4\xi_0$ y $\Delta = 0,001t$.

En el caso de fronteras tipo “armchair” el ancho de la película puede ser escrito como $W = 3ma_c$ o $W = 3(m \pm 1)a_c$, siendo m un número entero y a_c la distancia carbono - carbono del grafeno. Cuando el ancho es proporcional a $3m$ la densidad espectral se muestra en la fig. 4.2 a, donde los estados corresponden a los de un semi - metal teniendo en cuenta que no existe un gap en el espectro. Cuando W es proporcional a $3m + 1$ la densidad espectral se muestra en fig. 4.2 b, en este caso los estados presentan un gap en el espectro comportándose como un aislante [71].

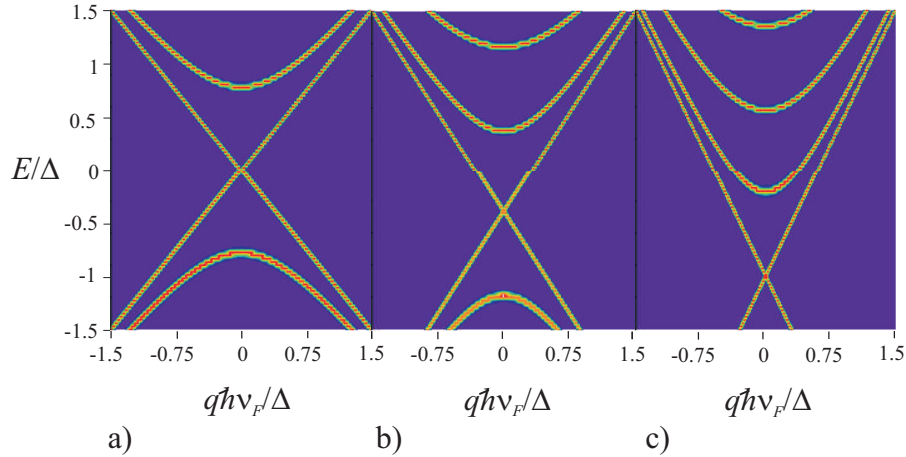


Fig. 4.3. Densidad de estados de la película G' con fronteras “armchair” para diferentes energías de Fermi $E_{FG'} = 0\Delta$, $0,4\Delta$ y 1Δ mostradas en a), b) y c) respectivamente. El ancho de la película es $W = 4\xi_0$.

La densidad de estados de la película depende del dopaje de la misma, lo cual se muestra en las fig. 4.3 donde se ha considerado la multiplicidad $3m$ (la cual consideramos a lo largo de este trabajo); en este caso se muestra que a medida que el dopaje aumenta el punto donde se tocan la banda de conducción y de valencia se desplaza hacia energías negativas en igual medida que

el dopaje, aumentando el número de estados con energía positiva los cuales están desdoblados.

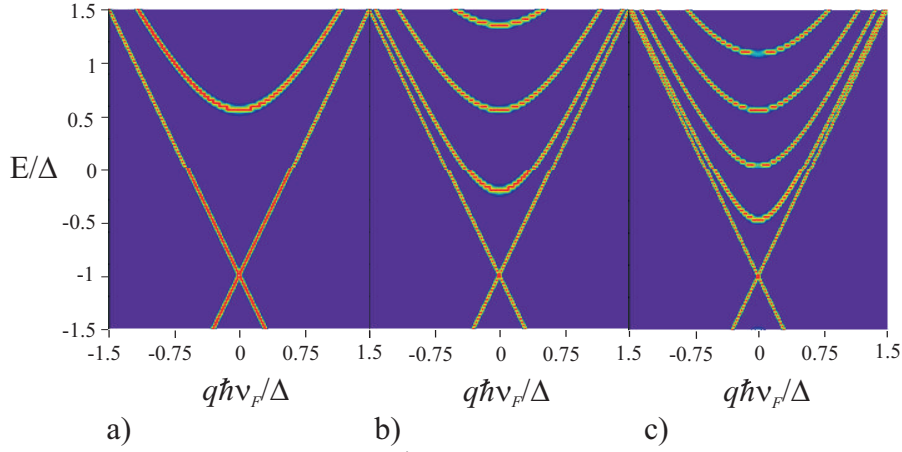


Fig. 4.4. Densidad de estados de la película G' con fronteras “armchair” para diferentes anchos $W = 2\xi_0, 4\xi_0$ y $6\xi_0$ mostradas en a), b) y c) respectivamente. El dopaje de la película es $E_{FG'} = 1 \Delta$, la multiplicidad es de $W = 3m$ y $\Delta = 0,001t$.

Analizando ahora la dependencia de la densidad de estados de la película con el ancho de ésta, como se ve en la fig. 4.4, cuando se considera un dopaje $E_{FG'} = 1 \Delta$, al aumentar el ancho de la película la densidad de estados no se desplaza con la energía como sucedía al aumentar el dopaje y aparece un mayor número de estados con una diferencia de energía menor entre ellos.

4.1.2. Frontera “zigzag”

Cuando las fronteras de la película son de tipo “zigzag” las funciones de Green se encuentran a partir de las expresiones (3.15) para $x < x'$ y (3.16) para $x > x'$, las cuales dependen de los coeficientes r_R^A y r_L^B , que se encuentran a partir de la ecuación (3.14). Cuando se considera que los bordes de la película están en $x_L = -W$ y $x_R = 0$, los coeficientes son

$$r_L^B = e^{-i\alpha} e^{2ikW} \text{ y } r_R^A = -e^{-i\alpha}, \quad (4.3)$$

la función de Green de la película G' para $x < x'$ es

$$g_c^{zz}(x, x') = \frac{-i}{2\hbar v (1 + e^{-2i\alpha} e^{2ikW}) \cos \alpha} \left(e^{ik(x'-x)} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_2^\dagger + e^{-i\alpha} e^{ik(x+x'+2W)} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_2^\dagger - e^{-i\alpha} e^{-ik(x+x')} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_1^\dagger - e^{-2i\alpha} e^{-ik(x'-x-2W)} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_1^\dagger \right), \quad (4.4)$$

y para $x > x'$

$$g_c^{zz}(x, x') = \frac{-i}{2\hbar v (1 + e^{-2i\alpha} e^{2ikW}) \cos \alpha} \left(e^{ik(x'-x)} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_1^\dagger + e^{-i\alpha} e^{ik(x+x'+2W)} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_1^\dagger - e^{-i\alpha} e^{-ik(x+x')} \hat{\varphi}_1 \hat{\varphi}_2^\dagger - e^{-2i\alpha} e^{-ik(x'-x-2W)} \hat{\varphi}_2 \hat{\varphi}_2^\dagger \right), \quad (4.5)$$

Los estados de energía se encuentran a partir de las soluciones de la ecuación $(1 + e^{-2i\alpha} e^{2ikW} = 0)$ que corresponde a los polos de la función de Green, La densidad espectral para este tipo

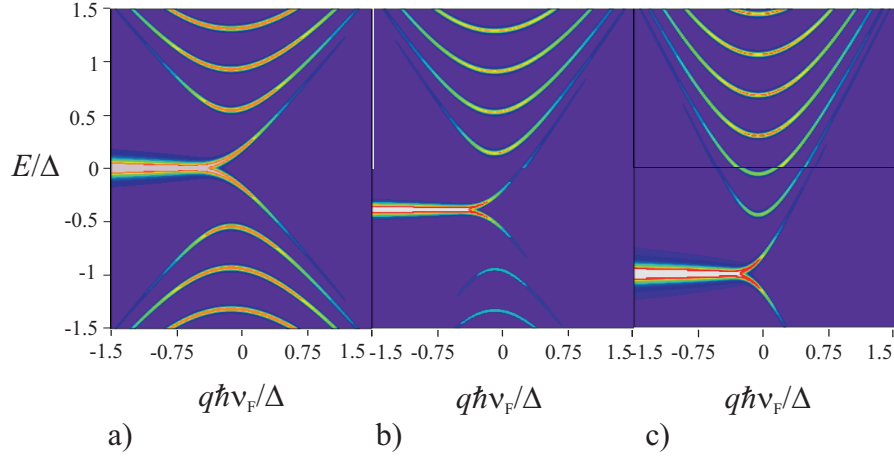


Fig. 4.5. Densidad de estados de la película G' con fronteras “zigzag” para diferentes energías de Fermi $E_{FG'} = 0\Delta$, 0.4Δ y 1Δ mostradas en a), b) y c) respectivamente. El ancho de la película es $W = 4\xi_0$ y $\Delta = 0.001t$.

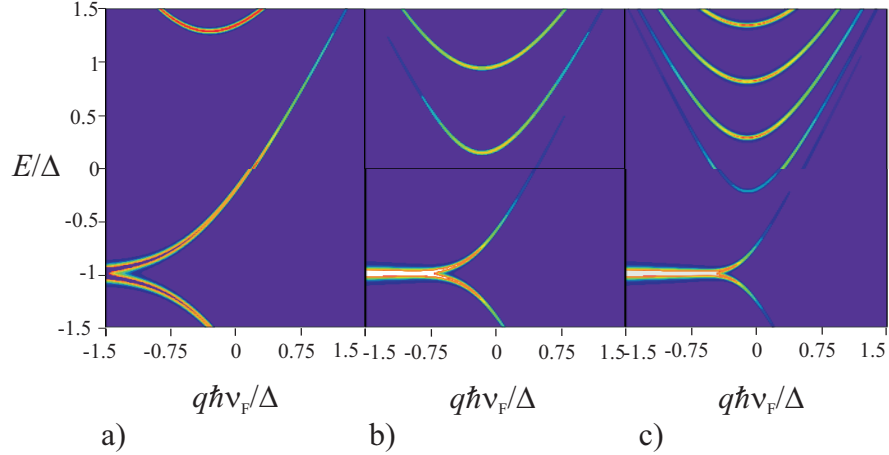


Fig. 4.6. Densidad de estados de la película G' con fronteras “zigzag” para diferentes anchos $W = 2\xi_0$, $4\xi_0$ y $6\xi_0$ mostradas en a), b) y c) respectivamente. El dopaje de la película es $E_{FG'} = 1\Delta$ y $\Delta = 0.001t$.

de frontera considerando diferentes dopajes de la película es mostrada en la fig. 4.5; en éste caso la densidad de estados presenta un estado para $E = 0$ que no se observa en el caso de frontera “armchair”, denominado estado superficial, que se desplaza hacia energías negativas a medida que aumenta el dopaje en la película, dicho aumento produce también un aumento en el número de estados con energía positiva de igual manera que ocurre para frontera “armchair”. La densidad de estados para frontera “zigzag” no es simétrica con respecto a q , esto debido a que las funciones de Green a partir de las cuales se encuentra la densidad considera un único valle K , cuando se incluye el otro valle las gráficas se hacen simétricas.

Cuando se analiza la densidad espectral en función del ancho de la película la cual es mostrada en la fig. 4.6, se encuentra que en este caso no existe multiplicidad en el ancho que afecte la densidad, por lo que el espectro de la película es independiente de la multiplicidad; adicionalmente, se observa que a medida que aumenta el ancho de la película la extensión en q del estado para $E = 0$ es mayor y el número de estados aumenta de manera similar a como ocurre para la película con fronteras “armchair”, pero sin la existencia de estados desdoblados.

4.2. Densidad de estados de la junta grafeno - grafeno - superconductor

Para iniciar el estudio del sistema $GG'S$ vamos a analizar el efecto del acople del grafeno G y el superconductor S sobre los estados de la película G' ; como veremos estos depende además de W y $E_{FG'}$, de los parámetros de acople entre G y G' y entre G' y S .

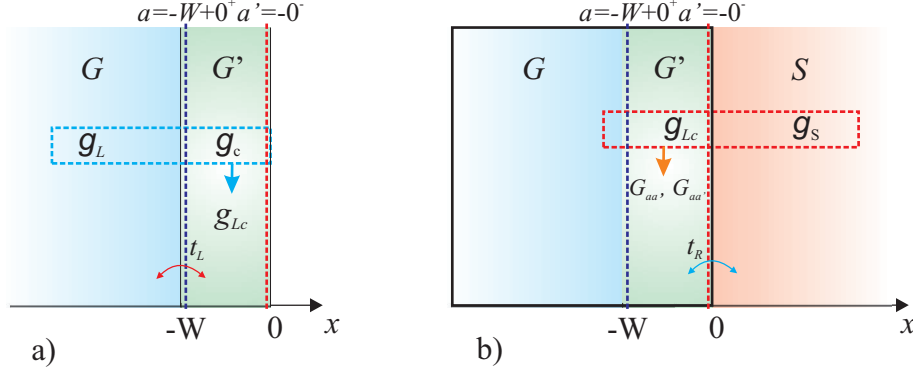


Fig. 4.7. Esquema del cálculo de la función de Green para $GG'S$. a) Acople entre las funciones de Green en equilibrio de G g_L y de G' g_c a partir de la cual se encuentra la función de acople para GG' , dada por g_{Lc} . b) Acople entre la función de Green para GG' g_{Lc} y la función de Green en equilibrio del superconductor S g_s , dada por G_{aa} evaluada en $x = x' = -W$ y $G_{aa'}$ evaluada en $x = -W$ y $x' = 0$. El parámetro de acople entre G y G' está dado por t_L y entre G' y S por t_R .

La densidad de estados se encuentra a partir de la función de Green del sistema, que en este caso corresponde a la función de Green del sistema acoplado, la cual presenta dos puntos de acople correspondientes a los bordes de la película. Para construir la función de Green del sistema se encuentra primero la función de Green perturbada para la interfase GG' en $x = -W$, ver fig. 4.7 a, para esto es necesario utilizar la ecuación de Dyson de la forma

$$g_{Lc,x,x'} = g_{c,x,x'} + t_L^2 g_{c,x,a} \tau_L M g_{L,a,a'} \tau_L^T g_{c,a,x'}, \quad (4.6)$$

donde g_L y g_c representan las funciones de Green de G y G' respectivamente, t_L representa el parámetro de acople entre GG' y

$$M = [I - t_L^2 g_{L,a,a'} \tau_L^T g_{c,a,a'} \tau_L]^{-1}. \quad (4.7)$$

Las matrices de acople τ_L para frontera “zigzag” están dadas por

$$\tau_L = t_L \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

y para frontera “armchair” por

$$\tau_L = t_L \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

con σ_x la matriz de Pauli y $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

El segundo acople se realiza entre la función de Green en equilibrio para (GG') g_{Lc} , que se acopla a la función de Green de S g_S en $x = 0$, ver fig. 4.7 b, las funciones de Green se evalúan en $x = x' = a$ y $x = a$ y $x' = a'$, para esto se utiliza la ecuación de Dyson de la forma

$$G_{aa} = g_{Lc,a,a} + t_R^2 g_{Lc,a,a'} \tau_R^T M_p g_{S,a',a'} \tau_R g_{Lc,a',a}, \quad (4.10)$$

$$G_{a,a'} = g_{Lc,a,a'} + t_R^2 g_{Lc,a,a'} \tau_R^T M_p g_{S,a',a'} \tau_R g_{Lc,a',a'}, \quad (4.11)$$

donde

$$M_p = (I - t_R^2 g_{S,a',a'} \tau_R g_{Lc,a',a'} \tau_R^T)^{-1}, \quad (4.12)$$

y τ_R es proporcional al parámetro de acople entre G' y S , para frontera “zigzag” esta dado por

$$\tau_R = t_R \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

y para frontera “armchair” por

$$\tau_R = t_R \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & -\sigma_x \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

El cálculo detallado de las funciones de Green para la junta $GG'S$ considerando una frontera de tipo “zigzag”² se encuentra en el apéndice D.

Los polos de la función de Green G_{aa} permiten encontrar los estados cuasiligados del sistema, los cuales dependen del ancho de la película, del dopaje del grafeno semi - infinito E_{FG} , de la película $E_{FG'}$ y del superconductor E_{FS} y de los parámetros de acople t_L y t_R . A continuación describimos la densidad espectral cuando se considera la película como un pozo de potencial $E_{FG}, E_{FS} > E_{FG'}$, en este caso consideramos diferentes valores para los parámetros de acople y anchos de G' .

Analizando inicialmente el efecto del parámetro de acople sobre la densidad de estados, fijamos el valor de $t_L = 1$ y variamos los valores de t_R para observar el efecto del aumento del acople con el superconductor sobre la densidad de estados como se muestra en fig. 4.8; en este caso se observa que cuando el acople con el grafeno semi - infinito es perfecto no se forman estados sino bandas de energía, que se observan con mayor claridad para la frontera “armchair” cuando el acople con el superconductor es túnel ($t_R = 0,1$), ver fig. 4.8 a, al aumentar el acople con el superconductor no es posible distinguir estados de energía para valores de energía específicos. Manteniendo ahora $t_R = 1$ y variando t_L la densidad espectral de la junta $GG'S$ es mostrada en la fig. 4.9 para frontera “armchair” y “zigzag”; en este caso la densidad de estados se comporta de manera similar a como lo hace la de la película de grafeno, con el aumento del dopaje de la película el número de estados para energías positivas aumenta, encontrando para frontera “zigzag” el estado superficial, ver fig. 4.9 d. El aumento del dopaje para $t_R = 1$, variando t_L y dopajes $E_{FG'} = 0$ produce que los estados se desdoblén y se separen formando dos estados desplazados en q en el caso de frontera “armchair” como se muestra en la fig. 4.9 a, cuando se aumenta el acople t_L se crean bandas donde los estados no están bien definidos en

²El cálculo de las funciones de Green para la frontera “armchair” se realiza de forma similar pero por la complejidad de las funciones de Green en este documento solo se incluyen las expresiones teóricas para frontera “zigzag”.

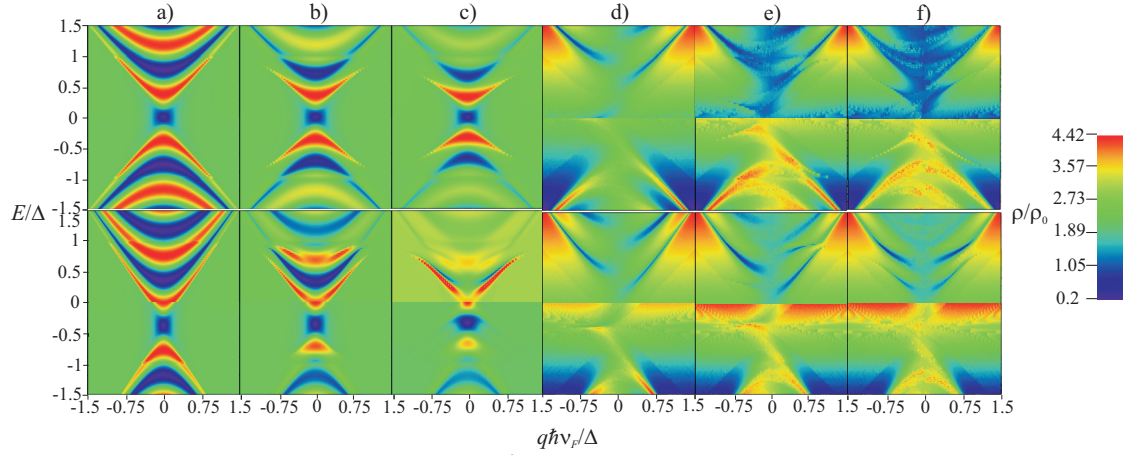


Fig. 4.8. Densidad espectral de la junta $GG'S$, con $t_L = 1$ y para diferentes valores de t_R en a) 0,1, b) 0,5 y c) 0,9, para la frontera “armchair” y los mismos valores de a), b) y c) en d) e) y f) para frontera “zigzag” respectivamente. Las gráficas superiores corresponden a $E_{FG'} = 0\Delta$ y las inferiores a $E_{FG'} = 0,4\Delta$. El ancho de la película en este caso es $W = 4\xi_0$, con ξ_0 la longitud de coherencia.

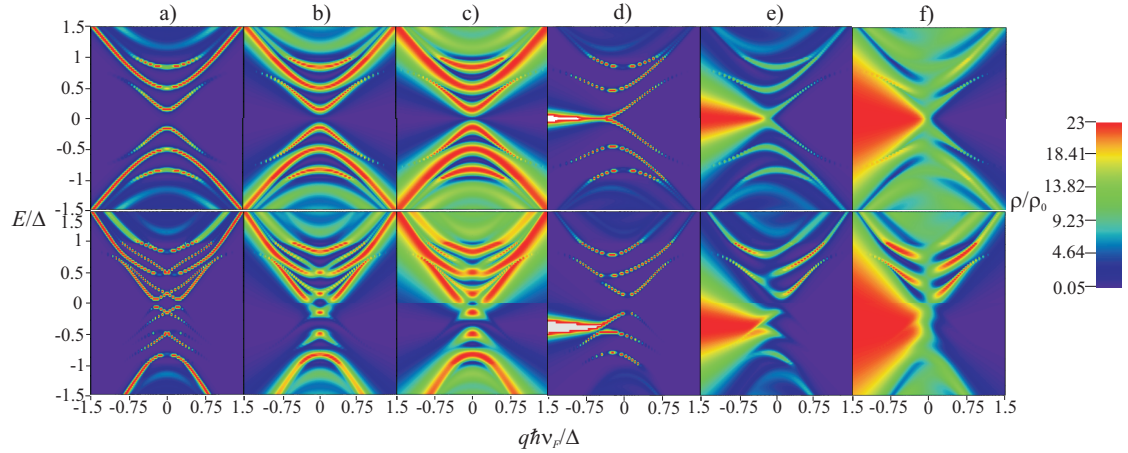


Fig. 4.9. Densidad espectral de la junta $GG'S$, con $t_R = 1$ y diferentes valores de t_L en a) 0,1, b) 0,5 y c) 0,9, para la frontera “armchair” y los mismos valores en d), e) y f) para frontera “zigzag” respectivamente. Las gráficas superiores corresponden a $E_{FG'} = 0\Delta$ y las inferiores a $E_{FG'} = 0,4\Delta$. El ancho de la película en este caso es $W = 4\xi_0$, con ξ_0 la longitud de coherencia.

energía; éste comportamiento se presenta para los dos tipos de frontera, aun cuando en el caso de frontera “zigzag” se sigue presentando un estado en $E = E_{FG'}$ que domina la densidad de estados y que se identifica también para la película con estos bordes ver fig. 4.9 f).

Teniendo en cuenta que los estados de energía se encuentran mejor definidos cuando $t_R = 1$ y $t_L = 0,1$ para los dos tipos de frontera, ver fig. 4.9 a y d, es posible concluir que estos se forman debido a la presencia del superconductor y por lo tanto se denominan estados de Andreev ya que aparecen por que se presentan reflexiones de Andreev en la interfase $G'S$; la aparición de estos estados se ha estudiado en una junta IGS donde se consideran fronteras “armchair”, se ha realizado a partir de las soluciones de las ecuaciones de BdG, en este caso se encuentra que el espectro de energía de las cuasipartículas se produce debido a las reflexiones de Andreev en la interfase GS y que el espectro de energía depende como en el caso de la junta $GG'S$ del

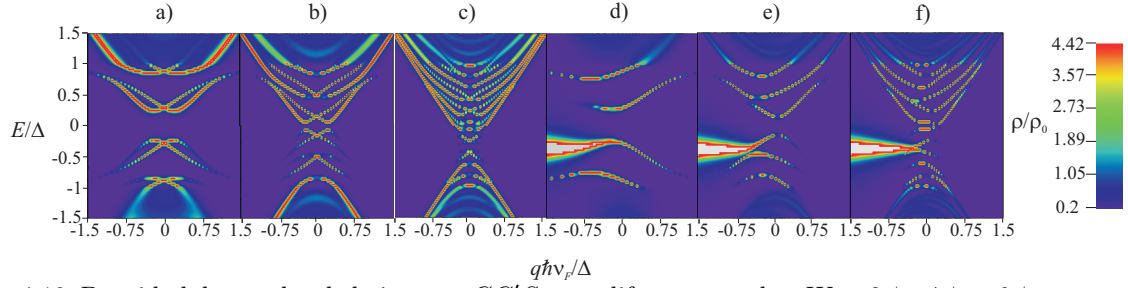


Fig. 4.10. Densidad de estados de la juntura $GG'S$ para diferentes anchos $W = 2 \xi_0$, $4 \xi_0$ y $6 \xi_0$ mostradas en a), b) y c) para fronteras “armchair” y en d), e) y f) con fronteras “zigzag” respectivamente. El dopaje de la película es $E_{FG'} = 0,4 \Delta$.

ancho de la región normal intermedia y de la energía de Fermi de cada región [158]. Concentrándonos ahora en los estados de Andreev nos interesa identificar el efecto que el ancho de la película tiene sobre dichos estados; para ésto encontramos la densidad de estados para diferentes anchos como se ilustra en la fig. 4.10 para frontera “armchair” y “zigzag”, en los dos casos se observa que a medida que el ancho de la película crece se produce un aumento en el número de estados, que a diferencia de como se observaban en la película ya no son simétricos en q . El estado superficial que aparece para la película con fronteras “zigzag”, se encuentra también para el sistema $GG'S$ y no se ve afectado por el ancho de G' .

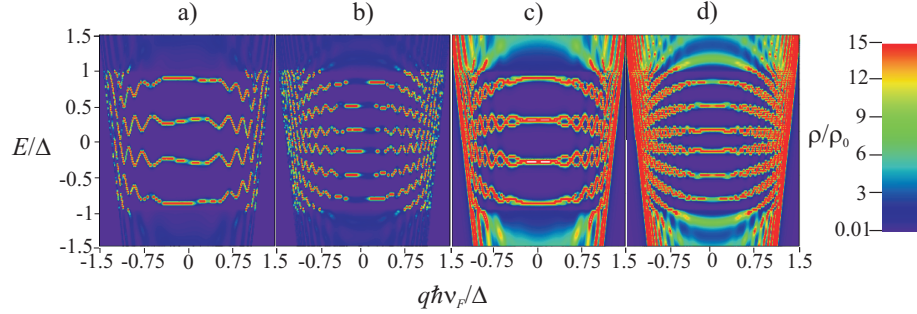


Fig. 4.11. Densidad de estados de la juntura $GG'S$ para diferentes anchos $W = 2 \xi_0$ y $4 \xi_0$, mostradas en a) y b) para fronteras “zigzag” y en c) y d) para fronteras “armchair” respectivamente. El dopaje de la película es $E_{FG'} = 10 \Delta$.

Cuando aumentamos el dopaje de la película, encontramos que el número de niveles de energía aumenta a medida que aumenta el ancho de la película de grafeno G' como se observa en la fig. 4.11; además, dichos niveles presentan oscilaciones para los dos tipos de frontera que no se presentan para dopajes bajos, que para frontera “armchair” se encuentran desdoblados.

4.3. Conductancia diferencial juntura grafeno - grafeno - superconductor

Para estudiar las propiedades de transporte en sistemas $GG'S$ hemos desarrollado un nuevo modelo que se ajusta a la geometría del sistema a partir de las expresiones encontradas para la juntura GS , por lo que la corriente se encuentra de la expresión (3.36); considerando que en un tiempo $t = -\infty$ L se encuentra a un voltaje V , G' esta aislado, S se conecta a tierra y en el tiempo $t \geq 0$ se acciona el acople, ver fig. 4.12, con g_c^γ y g_i^γ las funciones de Green en

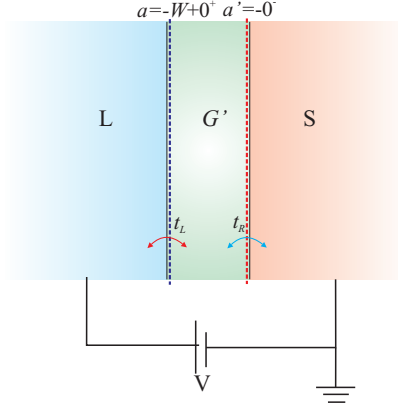


Fig. 4.12. Juntura $GG'S$. En este caso el grafeno es puesto a un voltaje V mientras que el superconductor se encuentra conectado a tierra. Las interfaces se caracterizan por parámetros de acople t_L y t_R y los acoples entre las funciones de Green se realizan en a y a' .

equilibrio, donde $i = L, S$ y $\gamma = + - (- +)$ el contorno de Keldysh. Para este sistema el cálculo de las funciones de Green se realiza teniendo en cuenta el contorno de la película limitado por $a = -W + 0^+$ y $a' = -0^-$, de tal forma que la corriente para este tipo de sistemas puede ser escrita como

$$I(E) = \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} (\tau_z (g_L^{+-}(E) \tau_L G_{aa}^{-+}(E) - g_L^{-+}(E) \tau_L G_{aa}^{+-}(E))). \quad (4.15)$$

donde las funciones de Green, el acople τ_L es definido según (4.9) y $\tau_z = \sigma_z \otimes I$ son matrices 4×4 , con σ_z la matriz de Pauli. La expresión encontrada para la corriente eléctrica será general para fronteras “zigzag” y “armchair”, por lo que solo más adelante se identificarán las diferencias para cada frontera. La función de Green fuera del equilibrio $G_{aa}^{+-}(E)$ se encuentra utilizando la ecuación de Dyson que en este caso se escribe como

$$G_{aa}^\gamma = G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r \tilde{g}_{LL}^\gamma \Sigma_{La}^a G_{aa}^a + G_{aa'}^r \Sigma_{a'S}^r g_{SS}^\gamma \Sigma_{Sa'}^a G_{a'a}^a, \quad (4.16)$$

donde \tilde{g}_{LL}^γ corresponde a la función de Green en equilibrio para un grafeno semi - infinito y g_{SS}^γ la funciones de Green en equilibrio del superconductor semi - infinito, las cuales pueden ser escritas en función de las funciones de Fermi como

$$\begin{aligned} g_{LL}^{-+}(E) &= -2\pi i \rho_{LL} (1 - f_{LL}), \quad g_{LL}^{+-}(E) = 2\pi i \rho_{LL} f_{LL}, \\ g_{SS}^{-+}(E) &= -2\pi i \rho (1 - f), \quad g_{SS}^{+-}(E) = 2\pi i \rho f, \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde las densidades de estado de la región izquierda ρ_{LL} y del superconductor ρ se calculan según la ecuación (3.44).

Reemplazando (4.16) y (4.17) en (4.15) la corriente es escrita como

$$\begin{aligned} I = \frac{4\pi^2 e}{h} \int dE \text{Tr} \tau_z [t_L \rho_{LL} ((f_{LL} t_L^T G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r \rho_{LL} - t_L^T G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r \rho_{LL} f_{LL}) \Sigma_{La}^a G_{aa}^a \\ + (f_{LL} t_L^T G_{aa'}^r \Sigma_{a'S}^r \tilde{\rho} - t_L^T G_{aa'}^r \Sigma_{a'S}^r \tilde{\rho}, f) \Sigma_{Sa'}^a G_{a'a}^a)], \end{aligned} \quad (4.18)$$

donde la función de Green $G_{aa}^{r(a)}$ y $G_{aa'}^{r(a)}$ se encuentra dependiendo del tipo de frontera de las interfases y utilizando las ecuaciones de Dyson, a partir de las funciones de Green en equilibrio del grafeno semi - infinito, la película y el superconductor (ver Apéndice D).

De forma similar a como se hizo para la juntura GS a partir de la expresión (4.18), es posible distinguir la corriente debida a las dispersiones de Andreev I_A de la corriente que se produce por electrones y huecos que se dispersan en cuasipartículas I_q , como se muestra en el apéndice E, en este caso la corriente puede ser escrita como

$$I = I_A + I_q, \quad (4.19)$$

donde

$$I_A = \frac{16e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{aa,eh}^r \bar{\rho}_{Lh} \hat{G}_{aa,he}^a \right) \hat{f}_{LL,ee} \right] \quad (4.20)$$

y

$$I_q = \frac{8e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\bar{\rho}_{Le} \left(\hat{G}_{aa',ee}^r \left(\bar{\rho}_{Se} \hat{G}_{a'a,ee}^a - \bar{\rho}_{S eh} \hat{G}_{a'a,he}^a \right) - \hat{G}_{aa',eh}^r \left(\bar{\rho}_{She} \hat{G}_{a'a,ee}^a - \bar{\rho}_{Sh} \hat{G}_{a'a,he}^a \right) \right) \right) \left(\hat{f}_{LL,ee} - \hat{f} \right) \right] \quad (4.21)$$

con

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_{Le(h)} &= \pi \hat{\tau}_L \hat{\rho}_{LL,ee(hh)} \hat{\tau}_L^T, \\ \bar{\rho}_{Se(h)} &= \pi \hat{\tau}_R^T \hat{\rho}_{a'a',ee(hh)} \hat{\tau}_R, \\ \bar{\rho}_{S eh(he)} &= \pi \hat{\tau}_R^T \hat{\rho}_{a'a',eh(he)} \hat{\tau}_R \end{aligned} \quad (4.22)$$

donde $\hat{G}_{aa,eh(he)}^r$, $\hat{G}_{aa',ee(hh)}^r$ y $\hat{G}_{aa',eh(he)}^r$ son matrices 2×2 que corresponden a las componentes de las funciones de Green G_{aa}^r y $G_{aa'}^r$ escritas en el espacio de Nambu. Las matrices que representan el acople $\hat{\tau}_L$ y $\hat{\tau}_R$ se escriben dependiendo del tipo de frontera de las interfase, para frontera “armchair” son

$$\hat{\tau}_L = t_L \sigma_x \text{ y } \hat{\tau}_R = t_R \sigma_x, \quad (4.23)$$

y para frontera “zigzag”

$$\hat{\tau}_L = t_L \sigma_1 \text{ y } \hat{\tau}_R = t_R \sigma_1. \quad (4.24)$$

Adicionalmente cuando tenemos fronteras “zigzag” es necesario distinguir si $x \rightarrow x' - 0^+$ donde la función de Green es $G_{aa}^r = G_{aa}^{>r}$ o $x \rightarrow x' - 0^-$ donde se utiliza $G_{aa}^r = G_{aa}^{<r}$.

La corriente I_A se denomina de Andreev debido a que la expresión (4.20) contiene términos que relacionan las densidades de estados de electrón y hueco en la región izquierda con las componentes de la función de Green que representa dispersiones entre electrones y huecos. La corriente I_q en (4.21) relaciona las densidades de estado de electrones en la región izquierda y cuasipartículas en el superconductor y componentes de la función de Green que representan dispersiones entre partículas desde la región izquierda hacia el superconductor.

La conductancia diferencial $\sigma = \frac{\partial I}{\partial V}$ a $T = 0K$ esta conformada por la contribución debida a las dispersiones de Andreev σ_A y la que se debe a la transmisión de cuasipartículas σ_q de la forma

$$\sigma = \sigma_A + \sigma_q, \quad (4.25)$$

donde

$$\sigma_A = \frac{16e^2}{h} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\bar{\rho}_{Le} \hat{G}_{aa,eh}^r \bar{\rho}_{Lh} \hat{G}_{aa,he}^a \right) \right], \quad (4.26)$$

y

$$\begin{aligned} \sigma_q = \frac{8e^2}{h} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\bar{\rho}_{Le} \left(\hat{G}_{aa',ee}^r \left(\bar{\rho}_{Se} \hat{G}_{a'a,ee}^a - \bar{\rho}_{Seh} \hat{G}_{a'a,he}^a \right) \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. - \hat{G}_{aa',eh}^r \left(\bar{\rho}_{She} \hat{G}_{a'a,ee}^a - \bar{\rho}_{Sh} \hat{G}_{a'a,he}^a \right) \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Para el tipo de frontera “zigzag” es posible encontrar una expresión analítica para la conductancia, debida a dispersiones de Andreev cuando se utilizan las expresiones encontradas para las funciones de Green en sistemas $GG'S$ tal como se ve en el apéndice E, la conductancia en este tipo de sistemas es

$$\begin{aligned} \sigma_{Ae(h)} &= \frac{16e^2}{h} t_L^4 \left| G_{aa,AAeh}^r \right|^2 \rho_{LL,BBee} \rho_{LL,BBhh} \\ &= \frac{8e^2}{h} t_L^4 t_R^4 \left| \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e d_h \right|^2 \cos \alpha_e \cos \alpha_h \end{aligned} \quad (4.28)$$

con

$$D = (D_e D_h - t_R^2 (D_e b e_2 - D_h a e_1) - t_R^4 a b (E_2^2 - E_1^2)), \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} a &= (D_e c_e + t_L^2 d_e^2 e^{-i\alpha_e}), \quad b = (D_h c_h + t_L^2 d_h^2 e^{i\alpha_h}), \quad D_{e(h)} = (c_{e(h)} e^{\mp i\alpha_{e(h)}} P^2 + 1), \\ d_{e(h)} &= \frac{e^{\pm iWk_e} (1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}})}{(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W})}, \quad c_{e(h)} = \frac{e^{\mp i\alpha_{e(h)}} (1 - e^{\pm 2ik_{e(h)}W})}{(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W})}, \quad e_{1(2)} = \left(E_2 \pm \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) \\ \text{y } E_1 &= (e^{-i\alpha_e^S} + e^{i\alpha_h^S})/2, \quad E_2 = (e^{-i\alpha_e^S} - e^{i\alpha_h^S})/2 \end{aligned} \quad (4.30)$$

donde $\sigma_{Ae(h)}$ representa la conductancia diferencial cuando la dispersión de Andreev es $e - h$ ($h - e$). Teniendo en cuenta que $G_{aa,AAeh}^r = G_{aa,AAhe}^r$, la conductancia diferencial $\sigma_{Ae} = \sigma_{Ah}$ independientemente del valor del parámetro de acople; éste comportamiento se evidenciaba para la juntura GS como se vio en la fig. 3.7, donde la conductancia era simétrica con respecto a la energía. La expresión (4.28), relaciona también las densidades de estados de e y h en la región L en la subred B , con la componente de la función de Green que representa las dispersiones $e - h$ en la subred A de la película de grafeno, mostrando como se acoplan los bordes para este tipo de frontera. El espectro de energía para el sistema $GG'S$ se relaciona con los polos de la función de Green que se encuentran cuando $D = 0$, la conductancia diferencial presenta máximos cuando se cumple esta condición por lo que la densidad de estados del sistema $GG'S$ se relaciona con

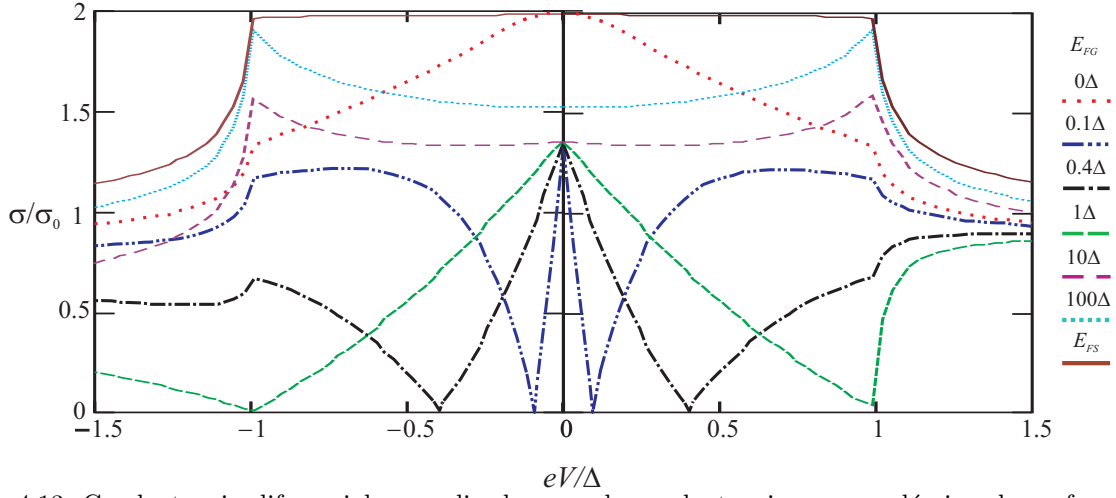


Fig. 4.13. Conductancia diferencial normalizada a σ_0 , la conductancia para una lámina de grafeno, en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$ para frontera “zigzag”, considerando diferentes dopajes del grafeno semi-infinito y de la película de grafeno los cuales se representan a través de su energía de Fermi $E_{FG} = E_{FG'}$, con $E_{FS} = 30\Delta$, $t_L = t_R = 1$. Los mismos resultados son encontrados para fronteras tipo “armchair”.

los máximos en la conductancia diferencial. La expresión para (4.29) se encuentra a partir del acople de todo el sistema $GG'S$ (ver apéndice D), esto debido a que D se relaciona con D_e y D_h las cuales resultan del acople entre la película y el grafeno semi - infinito.

Los resultados para la conductancia se muestran en fig. 4.13, donde se considera que el grafeno semi - infinito y la película de grafeno tienen la misma energía de Fermi $E_{FG} = E_{FG'}$ y corresponden a los encontrados para una juntura GS cuando se considera transparencia perfecta $t_L = t_R = 1$, ésto indica que el modelo desarrollado para la estructura $GG'S$ también reproduce los resultados encontrados con el modelo hamiltoniano extendido a la juntura GS permitiendo el análisis de las propiedades de transporte en sistemas más complejos.

4.3.1. Pozo de potencial

Cuando se considera la película de grafeno como un pozo de potencial ($E_{FG}, E_{FS} > E_{FG'}$) con parámetro de acople diferente de cero y anchos del orden de ξ_0 , se presentan estados de energía cuasiligados en el sistema $GG'S$, nuestro interés es analizar, a partir del modelo que hemos desarrollado, como dichos estados afectan la conductancia diferencial cuando se consideran diferentes dopajes y anchos de la película y diferentes valores para los parámetro de acople.

Para empezar consideramos el caso para $t_L = 1$ y $t_R = 0,1$, donde como vimos en la sección anterior no se pueden distinguir estados cuasiligados. Los resultados para la conductancia diferencial se muestran en fig. 4.14, donde se observa que al disminuir el acople con el superconductor se eliminan las resonancias en la conductancia diferencial para $|eV| < \Delta$ en el caso de frontera “armchair”, mientras que para frontera “zigzag” se presenta una resonancia para $-eV = E_{FG'}$ debida al estado superficial.

Los máximos de la conductancia diferencial corresponden a los observados en la densidad de estados de G' , la cual depende también del tipo de frontera como mostramos en la fig. 4.5 y 4.3 y explica el comportamiento distinto de la conductancia con respecto al tipo de frontera; en este caso se presentan máximos en la conductancia para $-eV = E_{FG'}$ cuando $eV \leq \Delta$ para frontera

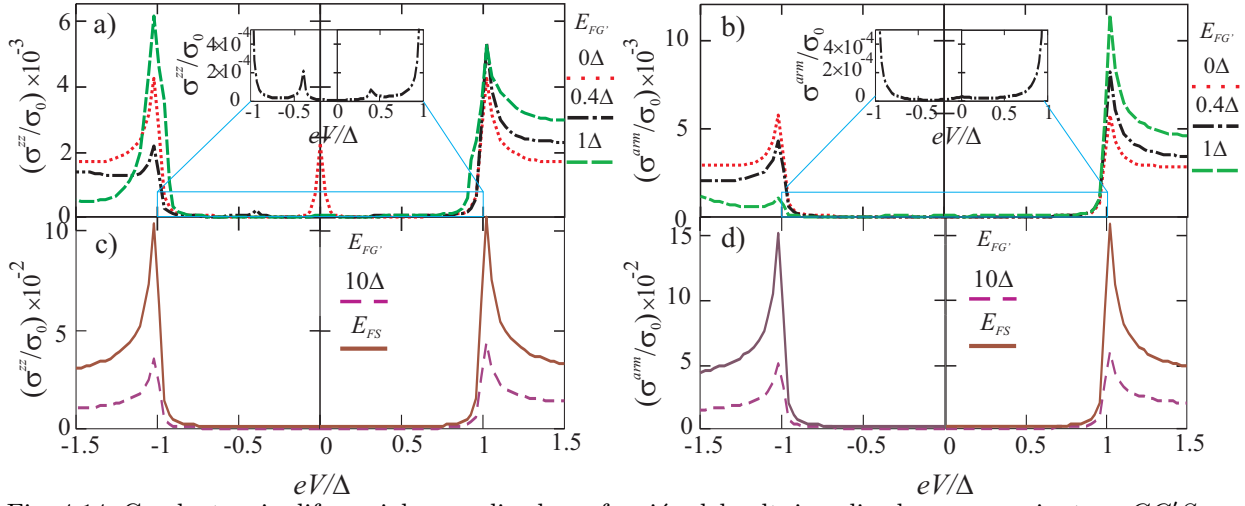


Fig. 4.14. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, para frontera “zigzag” a) y c) , para “armchair” b) y d). Los resultados se encuentran considerando diferentes dopajes de la película de grafeno y $E_{FG} = E_{FS} = 30\Delta$, con $t_L = 1$, $t_R = 0,1$ y σ_0 la conductancia para un lámina de grafeno.

“zigzag” que no se observan en el caso “armchair”, lo cual puede verse para $E_{FG'} = 0,4\Delta$ en el área ampliada en la fig. 4.14. Se presenta también un máximo en la densidad de estados para energía cero cuando $E_{FG'} = 0\Delta$ que se refleja en la conductancia, donde se presenta un pico a voltaje cero para la frontera “zigzag” únicamente.

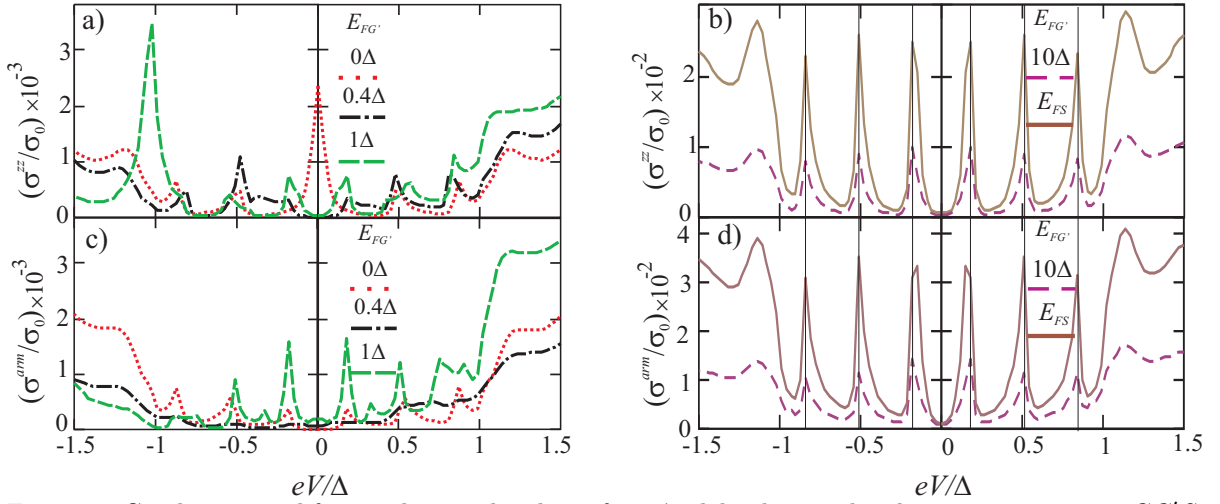


Fig. 4.15. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, para frontera “zigzag” a) y b) y para “armchair” c) y d); éstos resultados se encuentran considerando diferentes dopajes de la película de grafeno y $E_{FG} = E_{FS} = 30\Delta$, con $t_L = 0,1$, $t_R = 1$ y σ_0 la conductancia para un lámina de grafeno. Las líneas se usan como una guía visual para las energías a las que se presentan las resonancias.

Tomando valores del parámetro de acople de $t_L = 0,1$ y $t_R = 1$, aparece un espectro bien definido como vimos en la sección anterior. Los resultados encontrados para la conductancia diferencial con los valores de acople antes mencionados pueden verse en la fig. 4.15, donde se

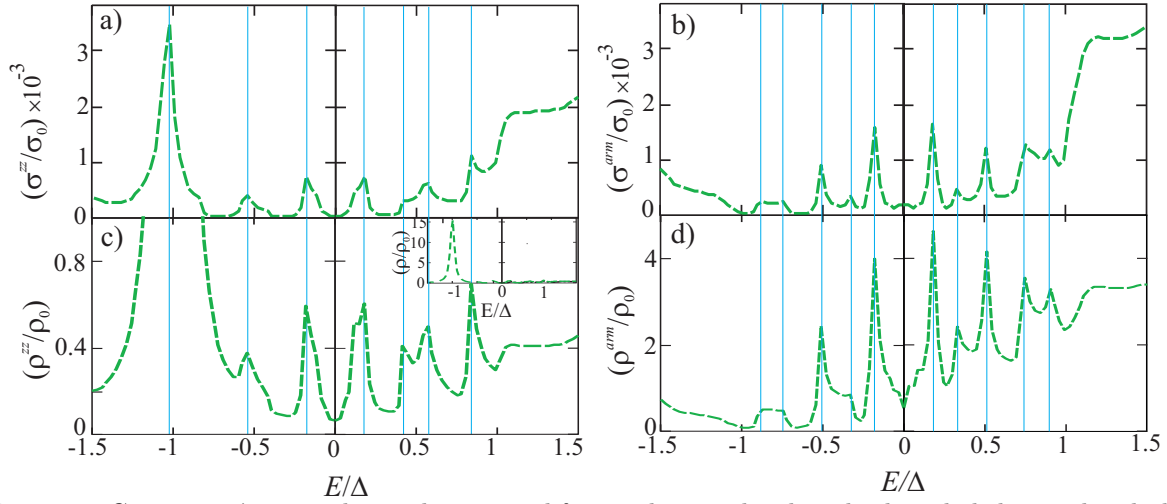


Fig. 4.16. Comparación entre la conductancia diferencial normalizada y la densidad de estados de la juntura $GG'S$ con respecto a la energía, para la frontera “zigzag” a) y c) y “armchair” b) y d); el ancho de la película en este caso es $W = 4\xi_0$, $E_{FG} = E_{FS} = 30\Delta$ y $E_{FG'} = 1\Delta$. La figura insertada en c) es un acercamiento de la misma para valores mayores donde se ve la resonancia para $eV = E_{FG'}$ para frontera “zigzag”. La densidad de estados se normaliza respecto a la densidad de estados de una lámina superconductora ρ_0 .

observa la aparición de resonancias en la conductancia diferencial con respecto al voltaje para dopajes bajos y altos de la película de grafeno, en este caso también se observa una resonancia en $-eV = E_{FG'}$ para la frontera “zigzag”; para dopajes altos, ver fig. 4.15 b) y d), se distingue que la energía para la cual aparecen las resonancias es similar para los dos tipos de fronteras.

En el caso de dopajes bajos ver fig. 4.15 a) y c), la conductancia presenta resonancias que corresponden a los niveles de energía que aparecen en la juntura $GG'S$, como se muestra al comparar la densidad de estados y la conductancia diferencial para los dos tipos de frontera como se muestra en fig. 4.16, donde se observa que la energía para la cual aparecen los estados y el número de estos depende del tipo de frontera y que para la frontera “armchair” el número de estados es mayor. El pico en la conductancia para $-eV = E_{FG'}$ corresponde al encontrado en la densidad de estados para la frontera “zigzag”; en este caso el acople con el grafeno semi-infinito es muy bajo por lo que los estados de Andreev se forman principalmente en la juntura $G'S$ y son diferentes según el tipo de frontera, para analizar los estados variamos el acople con el superconductor y el ancho de la película.

Los resultados para la conductancia diferencial cuando se varía el parámetro de acople con el superconductor se muestra en las fig. 4.17, donde se observa que a medida que disminuye t_R la conductancia diferencial disminuye y el número de resonancias presentes es menor, hasta llegar a $t_R = 0,1$ donde el efecto del superconductor es prácticamente nulo y no se presentan estados de Andreev; ésto indica que el aumento en el valor del parámetro de acople aumenta la probabilidad de que dispersiones de Andreev ocurran creando un mayor número de niveles de energía, por lo tanto, para $E < \Delta$ al no existir estados de Andreev la conductancia es muy baja mientras que para $E > \Delta$ aumenta debido a la transmisión de cuasipartículas.

Un efecto similar al de variar t_R se consigue al cambiar el ancho de la película de grafeno, el aumento del ancho de la película produce un aumento en el número de resonancias en la conductancia diferencial como se ve en la fig. 4.18; se encuentra también que el valor en energía

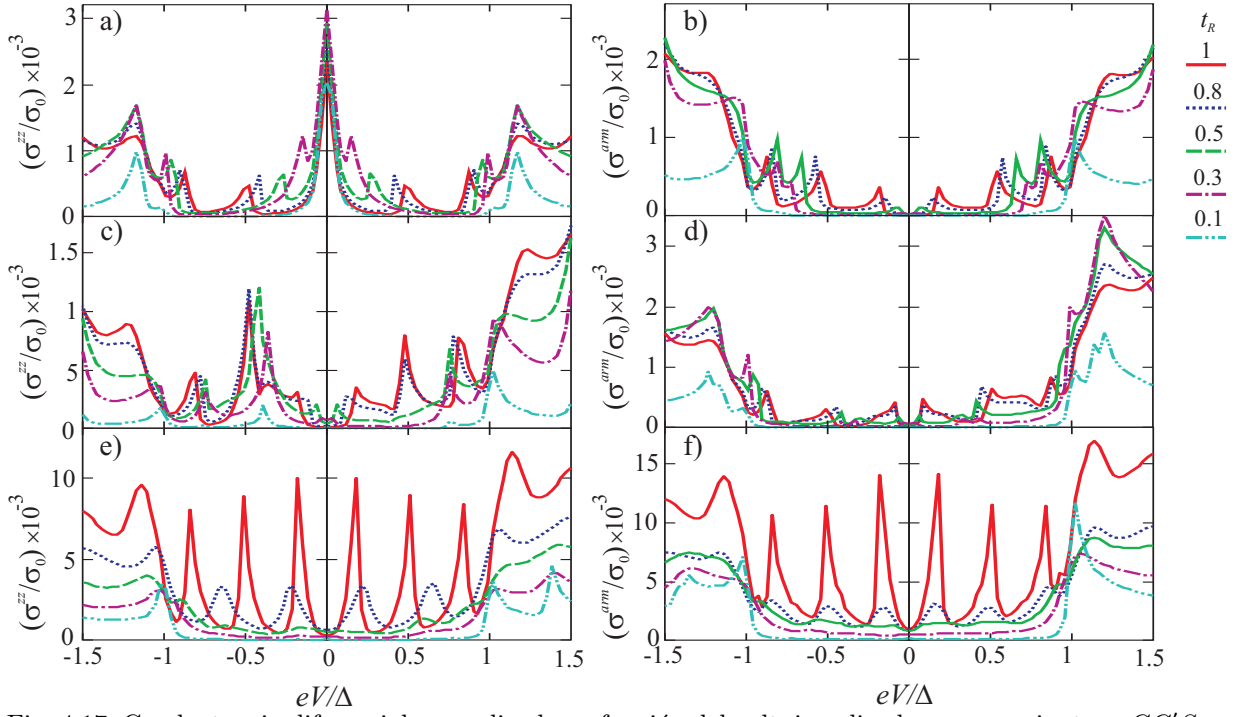


Fig. 4.17. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, considerando diferentes valores para el “hopping” $t_R, t_L = 0,1$, frontera “zigzag” a) , c) y e) y “armchair” b), d) y f), a) y b) con $E_{FG'} = 0\Delta$, c) y d) con $E_{FG'} = 0,4\Delta$ y e) y f) con $E_{FG'} = 10\Delta$.

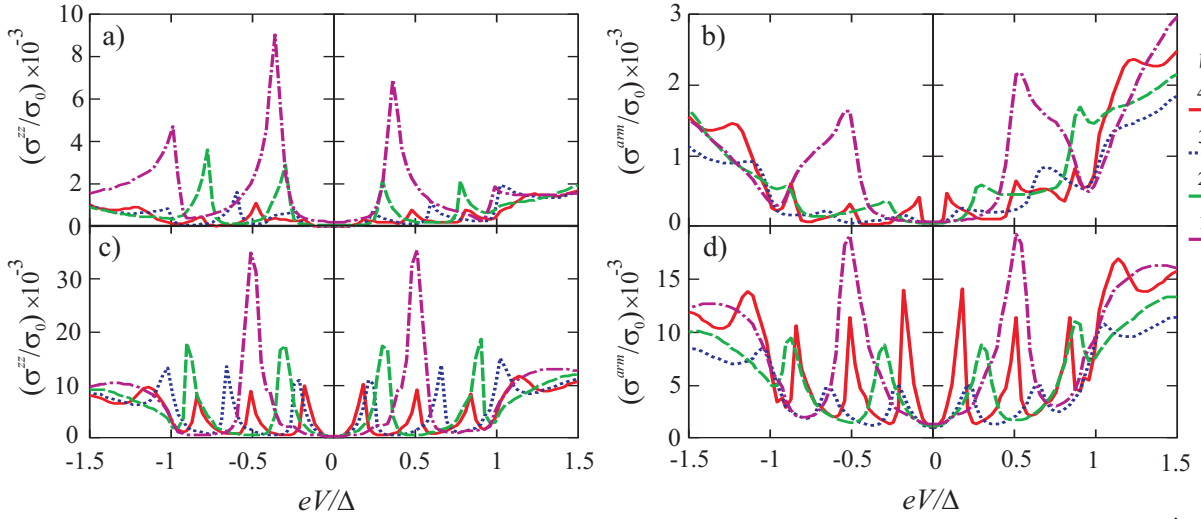


Fig. 4.18. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, considerando diferentes valores del ancho de la película, para “hopping” $t_R = 1, t_L = 0,1$, frontera “zigzag” a) y c) y “armchair” b) y d), donde a) y b) con $E_{FG'} = 0,4\Delta$ y c) y d) con $E_{FG'} = 10\Delta$.

para el cual se presentan las resonancias cambia con el ancho de la película, este comportamiento se presenta en la densidad de estados de la juntura $GG'S$ como se mostró en las gráficas fig. 4.10 e indica que a medida que G' aumenta un mayor número de dispersiones $e-h$ ocurren en el sistema, disminuyendo la diferencia entre los niveles de energía.

El análisis anterior muestra como las expresiones generales originales encontradas para la conductancia diferencial, permiten observar la formación de niveles de Andreev y su efecto sobre las propiedades de transporte en el sistema $GG'S$ para diferentes anchos y dopajes de la película de grafeno, así como diferentes valores para los parámetros de acople.

4.3.2. Barrera de potencial

El estudio de las interfase grafeno - superconductor es de gran importancia debido a que estos sistemas pueden servir para comprobar la denominada paradoja de Klein [67], la cual consiste en que una partícula pueda transmitirse a través de una barrera túnel con probabilidad 1. En la actualidad se han podido hacer observaciones experimentales de la paradoja de Klein con ayuda de medidas de la conductancia diferencial [68] y de magnetorresistencia en junturas con base en grafeno y dopajes $p - n$ [69]; también se han realizado estudios teóricos de las propiedades de transporte en junturas GIS a partir de las soluciones de las ecuaciones de BdGD para frontera “zigzag”, donde se ha podido observar la paradoja de Klein [156].

Cuando el ancho de la película de grafeno G' es $W \ll \xi_0$, dicha película puede verse como una barrera de potencial $E_{FG'}$ y la juntura $GG'S$ se considera como un sistema túnel donde es posible observar la paradoja de Klein. La película es caracterizada por un parámetro χ el cual relaciona el ancho de ésta y la altura del potencial $V_0 = E_{FG'}$ de la forma

$$\chi = \frac{V_0 W}{\hbar \nu_F}. \quad (4.31)$$

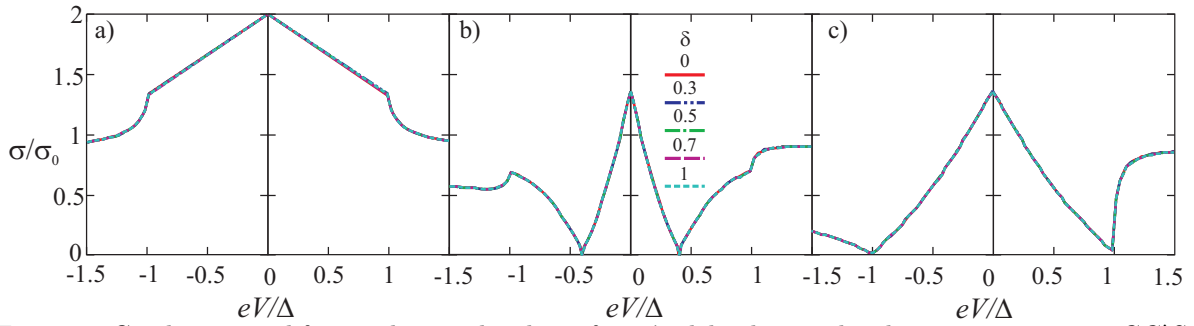


Fig. 4.19. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, considerando diferentes valores para δ , $t_R = t_L = 1$, $W = 1 \times 10^{-3} \xi_0$ y frontera “zigzag”, donde los dopajes son a) $E_{FG} = 0\Delta$ b) $0,4\Delta$ y c) 1Δ . Los mismos resultados se encuentran para frontera “armchair”.

Se analiza entonces la conductancia diferencial para diferentes dopajes del grafeno E_{FG} considerando dos rangos $E_{FG} \leq \Delta$ y $\Delta < E_{FG} < E_{FS}$. Para el primer rango de energías la conductancia diferencial se muestra en la fig. 4.19, para acople perfecto entre las interfases $t_L = t_R = 1$ y valores de $\chi = (n + \delta)\pi$, con n un número entero y δ un número entre 0 y 1, la conductancia diferencial corresponde a la mostrada en la fig. 4.13 para dopajes $E_{FG} \leq \Delta$ y que no se ve afectada para diferentes valores de χ , lo cual indica que las partículas incidentes sobre la barrera de potencial son transmitidas con probabilidad 1. Para entender mejor el comportamiento de la conductancia analizamos el comportamiento de los ángulos de incidencia de las cuasipartículas sobre la interfase α , los cuales están dados por

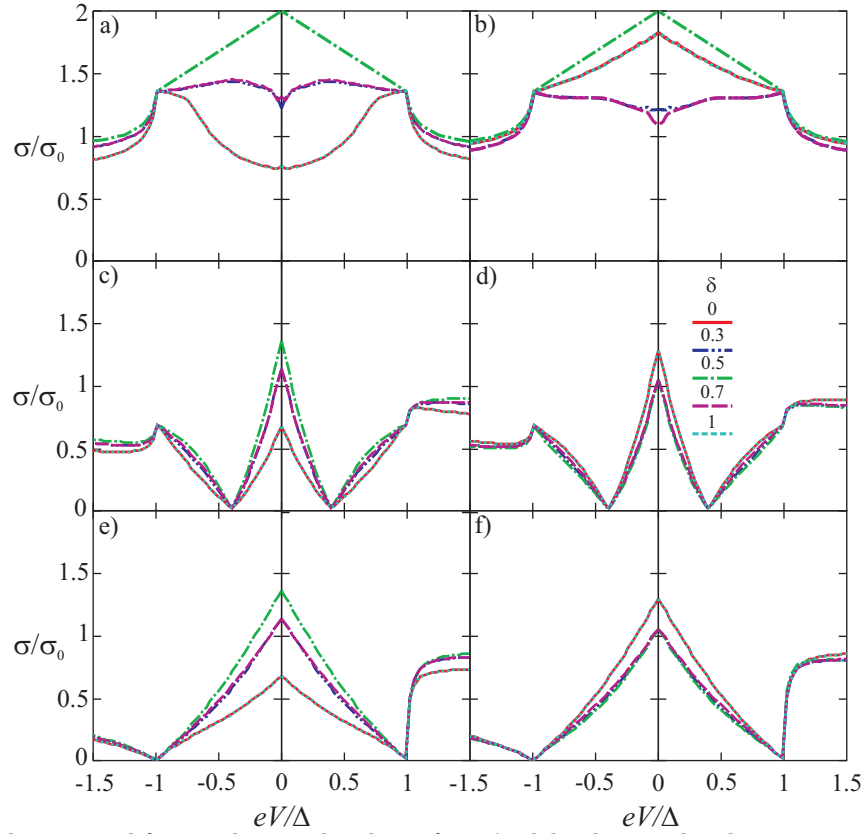


Fig. 4.20. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, considerando diferentes valores de δ , $W = 1 \times 10^{-3} \xi_0$ y $t_R = t_L = 0,8$, con dopajes a) $E_{FG} = 0\Delta$, c) $0,4\Delta$ y e) 1Δ para frontera “zigzag” y b) $E_{FG} = 0\Delta$, d) $0,4\Delta$ y f) 1Δ para fronteras “armchair”.

$$e^{\pm i\alpha_e} = \hbar v \frac{(k_{e(h)} \pm iq)}{(E + (E_F - V_0))} \text{ y } e^{\pm i\alpha_h} = \hbar v \frac{(k_{e(h)} \pm iq)}{(E - (E_F - V_0))}$$

con

$$k_{e(h)} = \sqrt{\frac{(E \pm (V_0 - E_F))^2}{v_F^2 \hbar^2} - q^2}. \quad (4.32)$$

Cuando el dopaje del grafeno semi - infinito es pequeño con respecto a la fortaleza de la barrera, el ángulo de incidencia α de las cuasipartículas sobre la barrera es pequeño lo cual hace más probable que estas se transmitan como si no existiera barrera; éste comportamiento es independiente del tipo de frontera y corresponde al encontrado por Bhattacharjee y otros autores [61, 63, 64, 157] para frontera “zigzag”.

Cuando el acople en las interfases disminuye $t_L = t_R = 0,8$, ver fig. 4.20, se encuentra que únicamente para valores de δ enteros se observa que la conductancia diferencial se mantiene inalterada con la fortaleza de la barrera, lo que se interpreta como un efecto de la paradoja de Klein; además, se encuentran diferencias en el comportamiento de la conductancia diferencial para cada frontera, lo cual muestra que el acople entre las interfases modifica las condiciones de incidencia de las cuasipartículas sobre las interfases, ya que cuando el acople no es perfecto

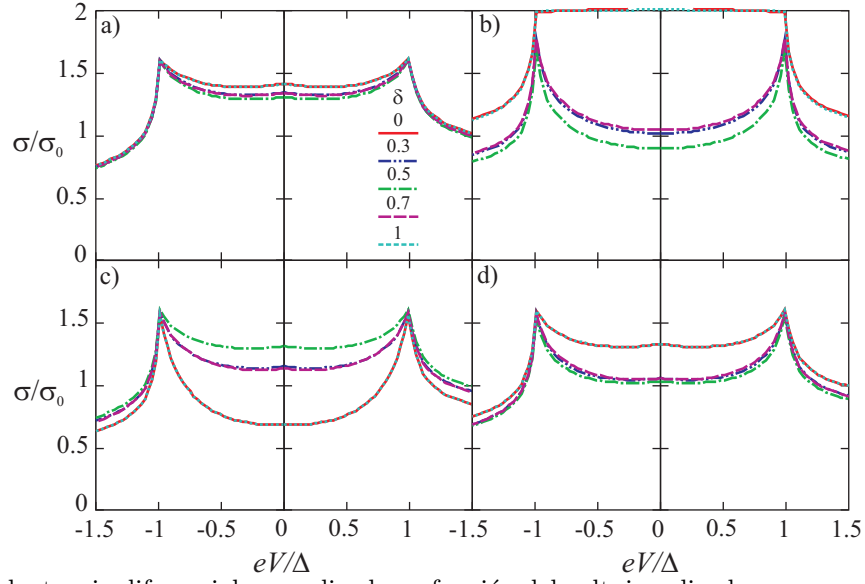


Fig. 4.21. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, con $W = 1 \times 10^{-3} \xi_0$, $t_R = t_L = 1$ y dopajes a) $E_{FG} = 10\Delta$, b) $E_{FG} = E_{FS}$, con a) y b) para frontera “zigzag” y obteniendo los mismos resultados para frontera “armchair”. Para $t_R = t_L = 0,8$ c) $E_{FG} = 10\Delta$ para frontera “zigzag” y d) $E_{FG} = 10\Delta$, para frontera “armchair”. Con σ_0 la conductancia para un lámina de grafeno.

las dispersiones en las interfases GG' y $G'S$ aumentan.

En el segundo rango $\Delta < E_{FG} < E_{FS}$, se encuentra un comportamiento similar al observado para $E_{FG} \leq \Delta$ cuando el acople en cada interfase no es perfecto, como se muestra en fig. 4.21, en este caso las energías de Fermi del grafeno semi-infinito y el superconductor son comparables y no se puede considerar la incidencia de las cuasipartículas sobre la interfase como perpendicular para cualquier valor de δ ; ésto hace que se presente una transmisión máxima únicamente para valores de χ proporcionales a $n\pi$ con n un número entero.

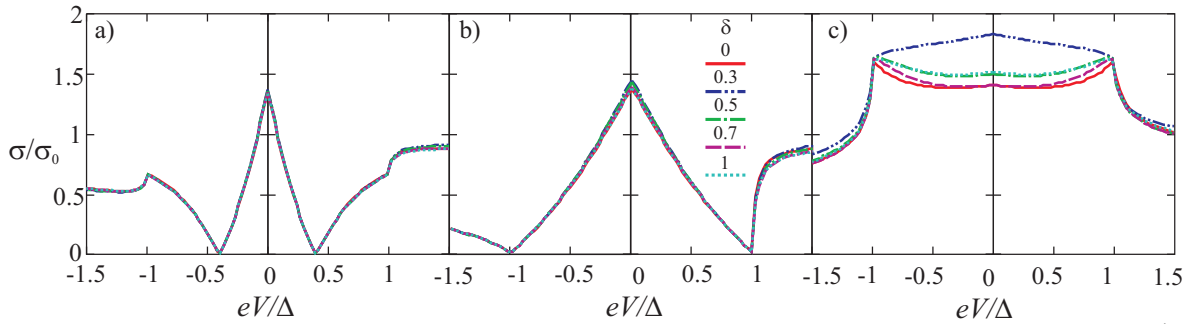


Fig. 4.22. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, con $W = 0,1 \xi_0$, $t_R = t_L = 1$ y a) $E_{FG} = 0,4\Delta$, b) $E_{FG} = 1\Delta$ y c) $E_{FG} = 10\Delta$ para frontera “zigzag”. Los mismos resultados se encuentran para frontera “armchair”.

Cuando el ancho de la juntura es $W < \xi_0$, el acople en las interfases es perfecto y $E_{FG} \leq \Delta$, la conductancia diferencial que se observa en las fig. 4.22 a y b, ya no toma los mismos valores en función del voltaje para cualquier valor de δ , ya que para $eV > \Delta$ los valores de conductancia son diferentes respecto al voltaje. Para $E_{FG} > \Delta$, ver fig. 4.22 c, el valor de la conductancia

diferencial con respecto al voltaje no es el mismo para valores de $\chi = n\pi$ como se observaba para anchos W menores; ésto indica que el ancho de la región G' afecta la transparencia de la barrera haciendo que sea posible la existencia de paradoja de Klein con transmisión perfecta sólo para $W \ll \xi_0$, éste resultado es el mismo para diferentes tipos de fronteras.

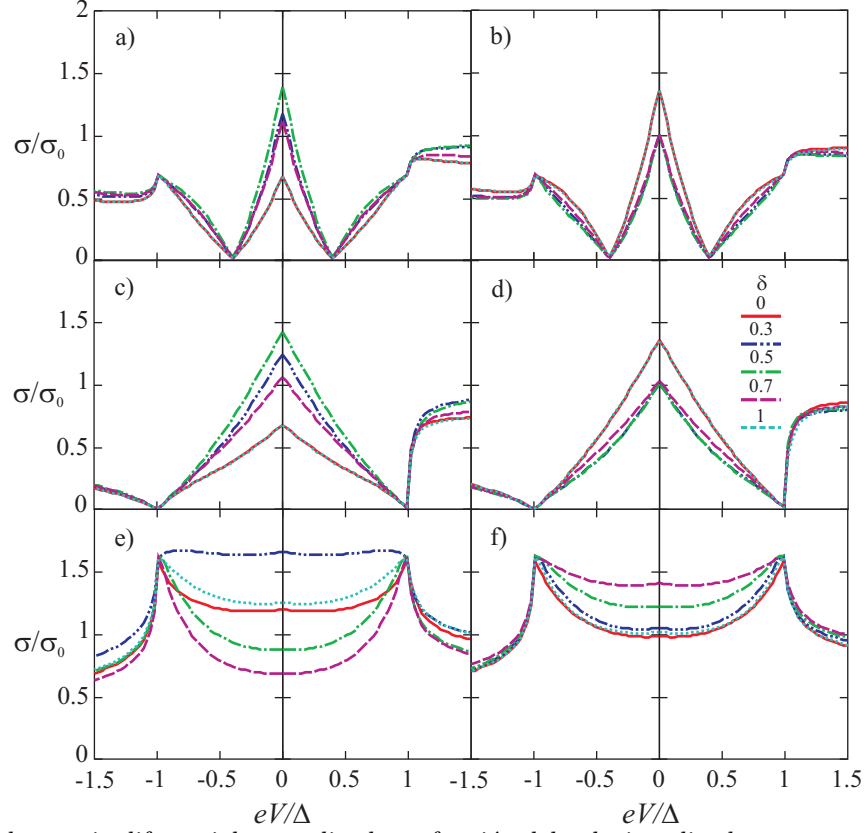


Fig. 4.23. Conductancia diferencial normalizada en función del voltaje aplicado para una juntura $GG'S$, con $W = 0,1\xi_0$, $t_R = t_L = 0,8$ y a) $E_{FG} = 0,4\Delta$, c) $E_{FG} = 1\Delta$ y e) $E_{FG} = 10\Delta$ para frontera “zigzag” y con los mismos valores de a), c) y e) en b), d) y f) respectivamente para frontera “armchair”.

Considerando ahora que el acople en las interfases no es perfecto y $W < \xi_0$, la conductancia diferencial se muestra en la fig. 4.23, en este caso se encuentra que para $E_{FG} \leq \Delta$ se presenta una transmisión máxima para valores de χ proporcionales a $n\pi$, ver fig. 4.23 a, b c y d, para estos valores la conductancia diferencial para fronteras “armchair” es mayor que para frontera “zigzag”; ésto debido a que para la frontera “armchair” el acople de los valles brinda más canales posibles para realizar una transmisión a través de la barrera. Para $E_{FG} > \Delta$ no se presenta paradoja de Klein en ningún tipo de frontera como se muestra en fig. 4.23 e y f. El análisis de las condiciones para que se presente la paradoja de Klein es novedoso ya que se incluyen los dos tipos de fronteras.

Lentes para el desdoblamiento de pares de Cooper

Como se analizó en el capítulo 2, es posible estudiar la conductancia diferencial cruzada en una juntura plana compuesta por dos electrodos normales separados por un superconductor de alta temperatura crítica; la que se encontró a partir de la amplitud de probabilidad de transmisión de las cuasipartículas entre los electrodos. En este capítulo estamos interesados en analizar la conductancia diferencial cruzada de un sistema similar pero compuesto ahora por grafeno, ésto con el animo de proponer un montaje experimental donde sea posible observar el “splitting” de pares de Cooper.

Adicionalmente, al explorar un sistema compuesto por dos electrodos normales separados por un superconductor con base en grafeno GSG se encuentra que, debido a la posibilidad de modificar el nivel de Fermi del grafeno utilizando una fuente externa, es posible construir una juntura con diferentes dopajes en cada uno de sus componentes, lo cual hace que en este sistema sea posible utilizar la óptica geométrica para describir las trayectorias clásicas de las partículas a través de una interfase. Para un sistema conformado por una interfase GG' dopada $n - p$, un electrón que incide desde G es refractado en G' con un ángulo de signo opuesto al incidente, lo cual corresponde a un sistema con índice de refracción negativo [77, 78], equivalente a una lente de Veselago para electrones [159], lo que permite enfocar los electrones en la región G' , como se muestra en la fig. 5.1 a. El enfoque de electrones es perfecto cuando la densidad de estados de ambos lados de la interfase $n - p$ es opuesta [77]. El cambio de signo del ángulo de los electrones refractados se debe a que el electrón que incide en la banda de conducción de G se transmite a G' en la banda de valencia como se muestra en la fig. 5.1 b, esto debido a que el ángulo de refracción esta relacionada con el signo de la energía de Fermi, como veremos más adelante.

Las lentes de Veselago pueden actuar como *filtros* para rayos de electrones con polarización de espín [160]. Para junturas $p - n$ se logra un enfoque del rayo de electrones, que se ha observado también cuando se utilizan cintas de grafeno [161] y en la superficie de aislantes topológicos [162].

Teniendo en cuenta lo anterior estamos interesados en observar el efecto que sobre el enfoque de electrones tiene la inclusión de un superconductor; ésto puede ser posible debido a que se han realizado experimentos donde se muestra un buen contacto entre electrodos superconductores y capas de grafeno [58, 132, 163, 164].

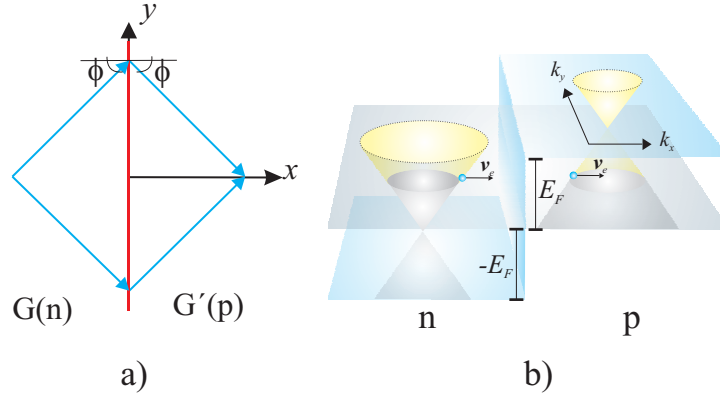


Fig. 5.1. Juntura GG' . a) diagrama de enfoque de los electrones. b) diagrama de bandas de la juntura dopada n - p .

5.1. Analogía óptica para una juntura grafeno - superconductor - grafeno

Para modelar la lente de Veselago que se muestra en la fig. 5.2, comenzamos por una lámina infinita de grafeno depositada sobre dos electrodos independientes, sobre la cual colocamos un electrodo superconductor en la región $0 < x < W_S$ el cual induce superconductividad en esta región por efecto de proximidad; llamamos región L a la que se encuentra en $x < 0$ y R a la que se ubica en $x > W_S$ que permanecen en estado normal, cuando se inyectan electrones a través de una fuente en la región L éstos pueden ser transmitidos al superconductor como estados evanescentes de quasipartículas; las quasipartículas pueden ser transmitidas a la región R si el ancho del superconductor W_S es del orden de la longitud de coherencia ξ , como electrones y huecos que son enfocados en diferentes puntos de la región R , como se muestra en la fig. 5.2.

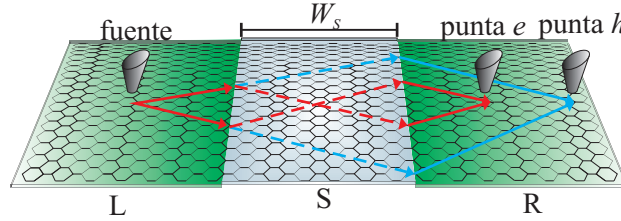


Fig. 5.2. Juntura GSG . Un electrón que incide desde el electrodo de la izquierda (líneas sólidas) se transforma en una quasipartícula electrón - hueco en el superconductor (líneas a trozos azules y rojas, respectivamente). En la región derecha, electrones y huecos (líneas sólidas) son enfocadas separadamente.

Para lograr el enfoque de los electrones y huecos en la región R se debe modular el dopaje para cada región del grafeno, en este caso el electrodo superconductor desplaza la banda electrónica del grafeno bajo él por transferencia de electrones produciendo el efecto de un dopaje tipo - n (dopado con electrones). Para un superconductor típico como Pb o Al $\Delta \sim 1meV$ por lo que $\xi = \hbar v_F / \Delta \sim 0,5 - 1\mu m$. Un electrodo de Al o Pd/Al en estado superconductor induce un dopaje tipo - n al grafeno sobre el que se deposita del orden de $E_S^F = -0,5eV$ [165]. En las regiones normales el dopaje es ajustado con ayuda de una fuente externa de tal manera que su nivel de Fermi sea positivo, por lo que las regiones L y R tienen un dopaje tipo - p (dopado

por huecos), de tal manera que el sistema corresponde a una juntura tipo *pnp* cuya estructura de bandas se muestra en la fig. 5.3.

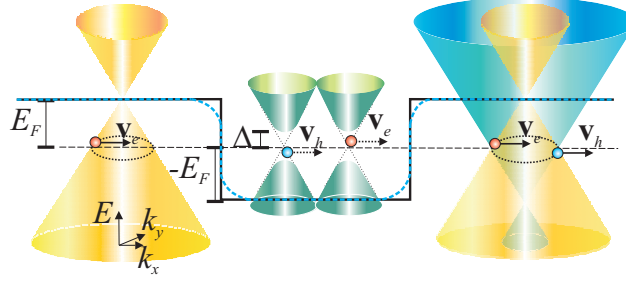


Fig. 5.3. Estructura de bandas, cuando los electrodos normales L and R se ajustan para tener un dopaje opuesto al de la región central superconductora S , un electrón que incide desde el electrodo de la izquierda con velocidad de grupo \mathbf{v}_e (línea sólida) se transforma en una cuasipartícula electrón y hueco en el superconductor con velocidades \mathbf{v}_e y \mathbf{v}_h respectivamente (líneas a trozos), que son transmitidas como electrones y huecos en la región derecha con velocidades \mathbf{v}_e y \mathbf{v}_h (líneas sólidas).

Si el ancho de la región superconductora central es comparable con la longitud de coherencia se presentan reflexiones de Andreev locales y no locales [79]. La reflexión de Andreev local ocurre cuando un electrón incidente desde un electrodo se combina con otro de la misma región para transmitir un par de Cooper a la región superconductora; la reflexión de Andreev no local o cruzada *CAR* se produce cuando el segundo electrón que forma el par de Cooper en el superconductor proviene del electrodo opuesto al del electrón incidente como mencionamos en el capítulo 2. Las *CAR* juegan un papel importante debido a que equivalen al desdoblamiento de un par de Cooper cuyos electrones están entrelazados; éstos procesos ocurren paralelamente a la transmisión de electrones entre los electrodos *EC*, un dispositivo para controlar el desdoblamiento de pares de Cooper fue estudiado recientemente [52, 53] encontrando que la competición entre *CAR* y *EC* reduce la eficiencia del desdoblamiento de los electrones.

5.1.1. Probabilidad de transmisión en una interfase grafeno - superconductor

La juntura *GSG* puede verse como una interfase *GS* en $x = 0$ y otra *SG* en $x = W_S$, un electrón que incide sobre la interfase en $x = 0$ desde la región *G* de la izquierda puede ser transmitido como cuasipartícula tipo electrón q_e o tipo hueco q_h al superconductor, de manera similar las cuasipartículas se propagan en el superconductor y pueden ser reflejadas en la interfase en $x = W_S$ o transmitidas a la región *G* en la derecha como electrón o como hueco. En la región derecha se enfocan los electrones que inciden desde la región *L*, de igual forma que los huecos que provienen de una transmisión del electrón como q_h en $x = 0$ y una posterior transmisión de la q_h como hueco. Para garantizar que un electrón incidente desde la región *L* pueda ser transmitido a la región *R*, analizamos las amplitudes de probabilidad de transmisión para dos tipos de interfases *GS* y *SG* normales a x ; para esto encontramos las soluciones de las ecuaciones de *BdGD* en la región *G* y en la región *S* siguiendo la metodología expuesta en el capítulo 2 para las junturas con cupratos.

Para la interfase *GS* estas soluciones se construyen considerando que un electrón incidente en la interfase desde la región normal puede ser reflejado como un electrón o un hueco con amplitud

de probabilidad r_{ee} y r_{eh} respectivamente, o ser transmitido al superconductor como una q_e o q_h con amplitud de probabilidad t_{eq_e} y t_{eq_h} respectivamente, por lo que las soluciones son

$$\psi^G(x) = e^{ik_e^G x} \begin{pmatrix} \varphi_{1e}^G \\ 0 \end{pmatrix} + r_{ee} e^{-ik_e^G x} \begin{pmatrix} \varphi_{2e}^G \\ 0 \end{pmatrix} + r_{eh} e^{ik_h^G x} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_{1h}^G \end{pmatrix}, \quad (5.1)$$

$$\psi^S(x) = t_{eq_e} e^{ik_e^S x} \begin{pmatrix} u\varphi_{1e}^S \\ v\varphi_{1e}^S \end{pmatrix} + t_{eq_h} e^{-ik_h^S x} \begin{pmatrix} v\varphi_{2h}^S \\ u\varphi_{2h}^S \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

donde la dependencia en y se omite debido a que el momentum en esta dirección, $\hbar q$ se conserva. Siguiendo la notación explicada en [140], hemos definido un espinor en el espacio de las subredes $\varphi_{1e(h)}^{G(S)T} = (1, e^{i\alpha_{e(h)}^{G(S)}})$, $\varphi_2^{G(S)T} = (1, -e^{-i\alpha_{e(h)}^{G(S)}})$ con $u^2(v^2) = (1 \pm \Omega/E)/2$ y $\Omega = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$.

Estamos interesados en el regimen donde $|E_F^G| = |E_F^S| \equiv E_F \gg \Delta$ y el electrón incide en el punto de Dirac ($E = 0$), en este regimen $k_{e,h}^G \approx k_{e,h}^S$ y $k_e^{G,S} = k_h^{G,S}$. Los ángulos de cada región son definidos como $\alpha_e^G = \alpha_h^G = \phi$ y $\alpha_e^S = \alpha_h^S = s\phi$ con $\phi = \arcsin \hbar v_F / E_F$ y $s = \text{sign}(E_F^G) \text{sign}(E_F^S)$, positivo cuando el dopaje no cambia al cambiar de región y negativo en caso contrario (i.e. para una juntura $n-p$ o una $p-n$). Aplicando condiciones de frontera en la interfase $\psi^G(0) = \psi^S(0)$, obtenemos las siguientes amplitudes de transmisión

$$t_{eq_e}^{GS} = \frac{ue^{-i(s-1)\phi/2} \cos\left((s+1)\frac{\phi}{2}\right) \cos\phi}{u^2 \cos^2\left((s+1)\frac{\phi}{2}\right) - v^2 \sin^2\left((s-1)\frac{\phi}{2}\right)} \quad (5.3)$$

$$t_{eq_h}^{GS} = \frac{ve^{i(s+1)\phi/2} i \sin\left((s-1)\frac{\phi}{2}\right) \cos\phi}{\left(u^2 \cos^2\left((s+1)\frac{\phi}{2}\right) - v^2 \sin^2\left((s-1)\frac{\phi}{2}\right)\right)} \quad (5.4)$$

Cuando el grafeno y el superconductor en la interfase GS tienen igual energía de Fermi $|E_F^G| = |E_F^S|$ y transparencia perfecta el electrón incidente es transmitido al superconductor únicamente como q_e cuando $s = 1$ por lo que $t_{eq_h}^{GS} = 0$. Se puede encontrar $t_{eq_h}^{GS} \neq 0$ cuando la transparencia de la interfase no es perfecta o si la juntura no es simétrica (i.e. $|E_F^G| \neq |E_F^S|$). La dependencia de la amplitud de probabilidad de transmisión con la transparencia de la interfase es estudiada en [61].

Teniendo en cuenta que es posible tener una amplitud de probabilidad diferente de cero de que el electrón incidente se transmita como q_e o q_h al superconductor, analizamos ahora la amplitud de probabilidad de transmisión de estas cuasipartículas que inciden desde el superconductor sobre el grafeno; para esto consideramos inicialmente una q_e que al incidir sobre la interfase SG se refleja como una q_e o q_h con amplitudes de probabilidad $r_{qe q_e}$ y $r_{qe q_h}$ respectivamente, o se transmite como electrón o como hueco con amplitud de probabilidad $t_{qe e}$ y $t_{qe h}$ respectivamente, en este caso las soluciones de las ecuaciones de $BdGD$ son

$$\psi^S(x) = e^{ik_e^S x} \begin{pmatrix} u\varphi_{1e}^S \\ v\varphi_{1e}^S \end{pmatrix} + r_{qe q_e} e^{-ik_e^S x} \begin{pmatrix} u\varphi_{2e}^S \\ v\varphi_{2e}^S \end{pmatrix} + r_{qe q_h} e^{ik_h^S x} \begin{pmatrix} v\varphi_{1h}^S \\ u\varphi_{1h}^S \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

$$\psi^G(x) = t_{qe e} e^{ik_e^G x} \begin{pmatrix} \varphi_{1e}^G \\ 0 \end{pmatrix} + t_{qe h} e^{-ik_h^G x} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_{2h}^G \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Cuando la incidencia sobre la interfase SG es de una cuasipartícula tipo hueco, este se puede reflejar como cuasipartícula tipo electrón o hueco con amplitudes de probabilidad r_{qhqe} y r_{qhqh} respectivamente o transmitirse como electrón o hueco con amplitudes de probabilidad t_{qhe} y t_{qhh} respectivamente, en este caso las soluciones son

$$\psi^S(x) = e^{-ik_h^S x} \begin{pmatrix} v\varphi_{2h}^S \\ u\varphi_{2h}^S \end{pmatrix} + r_{qhqh} e^{ik_h^S x} \begin{pmatrix} v\varphi_{1h}^S \\ u\varphi_{1h}^S \end{pmatrix} + r_{qhqe} e^{-ik_e^S x} \begin{pmatrix} u\varphi_{2e}^S \\ v\varphi_{2e}^S \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

$$\psi^G(x) = t_{qhe} e^{ik_e^G x} \begin{pmatrix} \varphi_{1e}^G \\ 0 \end{pmatrix} + t_{qhh} e^{-ik_h^G x} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_{2h}^G \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Las amplitudes de probabilidad de transmisión se encuentran aplicando condiciones de frontera $\psi^S(0) = \psi^G(0)$, estas amplitudes son

$$t_{qe(qhh)}^{SG} = \frac{u(u^2 - v^2) e^{\pm i(s-1)\phi/2} \cos\left((s+1)\frac{\phi}{2}\right) \cos(s\phi)}{\left(u^2 \cos^2\left((s+1)\frac{\phi}{2}\right) - v^2 \sin^2\left((s-1)\frac{\phi}{2}\right)\right)}, \quad (5.9)$$

$$t_{qe(qhe)}^{SG} = \frac{\pm iv(u^2 - v^2) e^{\pm i(s+1)\phi/2} \sin\left((s-1)\frac{\phi}{2}\right) \cos(s\phi)}{\left(u^2 \cos^2\left((s+1)\frac{\phi}{2}\right) - v^2 \sin^2\left((s-1)\frac{\phi}{2}\right)\right)}, \quad (5.10)$$

de tal manera que cuando $s = 1$, $t_{qh}^{SG} = t_{qe}^{SG} = 0$, por lo tanto, en una juntura GSG dopada como pn , un electrón que incide desde el grafeno en la región izquierda puede ser transmitido como una cuasipartícula tipo electrón y tipo hueco al superconductor, estas cuasipartículas pueden ser transmitidas al grafeno de la región derecha como electrones y huecos coincidiendo con la analogía óptica.

5.1.2. Separación del punto de enfoque de electrones y huecos

Teniendo en cuenta que es posible que los electrones que inciden en la región L se transmitan a la región R como electrones o como huecos, en esta sección realizamos la descripción de los momentos y velocidades de grupo que las partículas presentan en sus trayectorias clásicas, las cuales pueden ser descritas por analogía a través de la óptica geométrica. El comportamiento de los rayos que describen cada tipo de partícula puede explicarse de manera cualitativa a través de sus vectores de onda y velocidades de grupo, los primeros están dados por

$$\mathbf{k}_{e(h)}^i = k_{e(h)}^i \mathbf{i} + q\mathbf{j}, \quad (5.11)$$

con $i = L, R, S$ dependiendo de la región, los vectores de onda en la región L o R son

$$k_{e(h)}^{L,R} = \sqrt{\frac{(E \pm E_F)^2}{v_F^2 \hbar^2} - q^2}, \quad (5.12)$$

y en la región superconductora

$$k_{qe(qh)}^S = \sqrt{\frac{\left(E_{FS} \pm \sqrt{E^2 - |\Delta|^2}\right)^2}{v_F^2 \hbar^2} - q^2}. \quad (5.13)$$

Teniendo en cuenta que las regiones normales L y R están dopadas tipo - p con $E_F > 0$, mientras que la región S esta dopada tipo - n con $E_F < 0$; para el regimen de altos dopajes ($|E_F| \gg \Delta, E$) no existe diferencias entre el vector de onda para las partículas en las regiones normales y en el superconductor por lo que $k_{e(h)}^{L,R} \approx k_{q_e(q_h)}^S$, además, si los electrones se inyectan con energía cercana al punto de Dirac ($E \rightarrow 0$) se tiene simetría electrón - hueco y el vector de onda de ambos tipos de cuasipartículas es el mismo ($k_{e(q_e)} = k_{h(q_h)}$).

Las velocidades de grupo para electrones, huecos y para las cuasipartículas se escribe como $\mathbf{v}_{e(h)}^{c,v} = \pm v_F \mathbf{k}_{e(h)} / |\mathbf{k}_{e(h)}| = \pm v_F \mathbf{k}_{q_e(q_h)} / |\mathbf{k}_{q_e(q_h)}| = \pm v_F (\cos \phi_{p,n}, \sin \phi_{p,n})$ con c y v correspondiente a la banda de conducción y de valencia respectivamente y $\mathbf{v}_{h(q_h)}^{c,v} = -\mathbf{v}_{e(q_e)}^{c,v}$. El signo del ángulo depende del signo del dopaje de la forma $\phi_{p(n)} = \arcsin[\hbar v_F k_y / \pm E_F]$ y los subíndices p y n corresponden al dopaje de cada región; para entender el comportamiento de los vectores de onda y las velocidades de cada partícula se realiza la gráfica en la fig. 5.4. Considerando el signo debido a la banda (conducción o valencia) y la conservación de momentum paralelo a la interfase encontramos una expresión equivalente a la ley de Snell $n_{LS,SR} = \sin \phi_{p,n} / \sin \phi_{n,p}$, pero para las partículas en cada interfase [77, 162].

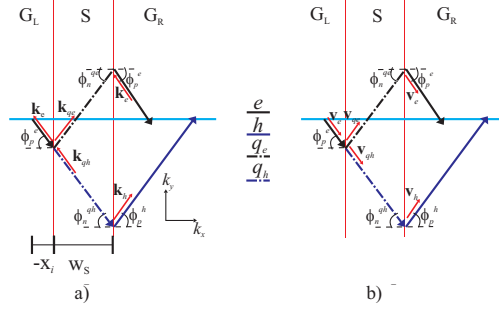


Fig. 5.4. Diagrama de la juntura pnp donde se muestran los diferentes a) vectores de onda y b) velocidades de grupo para las partículas en cada región, cuando un electrón que incide en la región L se dispersa como q_e y q_h en el superconductor, para transmitirse como electrón y hueco en la región R .

Cuando el electrón inyectado en la región L se transmite como q_e al superconductor el cambio de banda crea un índice de refracción negativo $n = -1$, con un ángulo transmisión de signo opuesto al incidente y la trayectoria se modifica tal como se ilustra en la fig. 5.4, cuando el electrón incidente es transmitido como q_h el índice de refracción es positivo $n = 1$ y la trayectoria de q_h no se modifica con respecto a la del electrón incidente. En la segunda interfase las cuasipartículas q_e y q_h que se transmiten como electrón y hueco respectivamente tienen un índice de refracción negativo por lo que se refractan hacia el eje óptico, esto explica la trayectoria clásica que se muestra en fig. 5.2 y que son descritas en la siguiente ecuación

$$y^{e(h)}(x) = \begin{cases} y_0 + x \tan \phi_p^e & x < 0, \\ y_0 + x \tan \phi_n^{q_e(q_h)} & 0 < x < W_S, \\ y_W + x \tan \phi_p^{e(h)} & x > W_S, \end{cases} \quad (5.14)$$

con $y_0 = -x_i \tan \phi_p^e$, $y_W = y_0 + W_S (\tan \phi_n^{q_e(q_h)} - \tan \phi_p^{e(h)})$, $\phi_{n(p)}^{e(q_e)} = -\phi_{n(p)}^{h(q_h)}$ y x_i el punto de incidencia de los electrones que se muestran en la fig. 5.4, donde hemos considerado que el hueco es creado en la primera interfase.

5.2. Procesos no locales en la juntura grafeno - superconductor - grafeno

La analogía con la óptica nos permite identificar diferentes puntos de enfoque de electrones y huecos en la región R , pero estos puntos de enfoque también pueden ser vistos como probabilidades de encontrar transmisión de electrones desde la región L a la región R o cotunelamiento de electrones EC y de electrones en L a huecos en R o reflexiones de Andreev cruzadas o no locales CAR . Para encontrar las probabilidades CAR y EC , se utiliza la función de Green que acopla las tres regiones siguiendo la metodología usada en el capítulo 4 y considerando fronteras tipo “zigzag”, pero ahora con el grafeno al cual se le induce superconductividad conformando la región central; en este caso se construye una función de Green en equilibrio para las regiones L y R en los puntos a y b respectivamente y otra para el superconductor S en los puntos a_S el cual se encuentra acoplado al punto a de la región L y b_S el cual se encuentra acoplado al punto b de la región R , ver fig. 5.5.

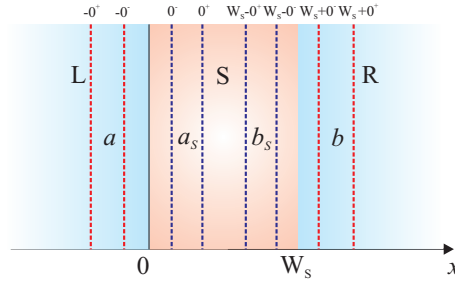


Fig. 5.5. Diagrama de la juntura GSG , donde las regiones de grafeno normal L y R se acoplan con el superconductor entre a y a_S y b y b_S , el subíndice S corresponde a los puntos de acople en el superconductor.

El producto directo de las funciones de Green para las dos regiones de grafeno es

$$g_G = \begin{pmatrix} \hat{g}_{aa}^{<L} & 0 \\ 0 & \hat{g}_{bb}^{>R} \end{pmatrix},$$

donde las componentes de esta función corresponden a las funciones de Green en la región L , $\hat{g}_{aa}^{<L} = \hat{g}^L(x, x')$ la cual se define para $x < x'$ y en la región R , $\hat{g}_{bb}^{>R} = \hat{g}^R(x, x')$ la cual se define para $x > x'$, tal como se muestra en la fig. 5.5, éstas corresponden a matrices 4×4 . La función de Green para el superconductor es

$$g^S = \begin{pmatrix} \hat{g}_{a_S a_S}^{>} & \hat{g}_{a_S b_S} \\ \hat{g}_{b_S a_S} & \hat{g}_{b_S b_S}^{<} \end{pmatrix},$$

donde las funciones $\hat{g}_{a_S a_S}^{>}$ y $\hat{g}_{b_S b_S}^{<}$ corresponden a las funciones de Green del superconductor que se acopla a la región L y R , definidas para $x > x'$ y $x < x'$ respectivamente, y las funciones $\hat{g}_{b_S a_S}$ representan los propagadores no locales en el superconductor que permiten acoplar las regiones L y R . La función de autoenergía que representa el acople entre las regiones L y R y el superconductor es

$$\Sigma_{GS} = \begin{pmatrix} \hat{\Sigma}_{a, a_S} & 0 \\ 0 & \hat{\Sigma}_{b, b_S} \end{pmatrix}, \text{ con } \hat{\Sigma}_{a, a_S}(b, b_S) = t_L = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 \end{pmatrix}$$

donde $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Para encontrar la función de Green que acopla todo el sistema se utiliza la ecuación de Dyson, de la cual se encuentra una expresión de la forma

$$G = g^G + g^G \Sigma_{GS} (I - g^G \Sigma_{GS} g^S \Sigma_{SG})^{-1} g^S \Sigma_{SG} g^G,$$

donde G representa la función de Green del sistema GSG acoplado y que en componentes puede ser escrita como

$$G = \begin{pmatrix} \hat{G}_{aa} & \hat{G}_{ab} \\ \hat{G}_{ba} & \hat{G}_{bb} \end{pmatrix},$$

con $\hat{G}_{aa(bb)}$ la función de Green local en el contacto $a(b)$ y $G_{ab(ba)}$ la función de Green no local entre los contactos a y b (b y a). Las propiedades de transporte pueden ser expresadas en términos de las funciones de Green en el espacio; para encontrar dichas funciones usamos la transformada de Fourier $G(x, x'; y - y') = \int dq e^{iq(y-y')} G(x, x')$, inyectando los electrones en la región L ($x' < 0$) la transmisión de electrones y huecos en la región R esta dada por

$$T_{ee} \propto \left| \text{Tr} \left(G_{ab}^{ee}(x, x'; y - y') \right) \right|^2, \quad (5.15)$$

$$T_{eh} \propto \left| \text{Tr} \left(G_{ab}^{eh}(x, x'; y - y') \right) \right|^2. \quad (5.16)$$

A partir de las probabilidades de transmisión es posible estudiar dos fenómenos que afectan el enfoque de los electrones en la región R , la aparición de cáusticas o deformaciones de las trayectorias clásicas de las partículas y las multiples reflexiones que pueden tener lugar en el superconductor.

5.2.1. Cáusticas en la interfase grafeno - superconductor - grafeno

Cuando el dopaje de una de las regiones no es exactamente igual al de las otras (i.e. cuando $|E_F^S| \neq |E_F^G|$) $n \neq -1$, las trayectorias clásicas de las partículas son deformadas en la región $x > W_S$ desplazando el punto focal que se muestra en la fig. 5.3 y convirtiéndose en rayos refractados que forman una curva cáustica, como se ilustra en la fig. 5.6 a. Para encontrar la cáustica se obtiene primero el nuevo punto de enfoque de los rayos o cúspide $x_{cus}(\phi_n^{e(h)})$ a partir de la condición $\partial y^{e(h)} / \partial \phi_n^{e(h)} = 0$, el cual puede ser escrito como

$$x_{cus}^{e(h)} = -\frac{W_s}{n^2} \sqrt{\left(\frac{n^2 - \sin^2 \phi_n^{e(h)}}{1 - \sin^2 \phi_n^{e(h)}} \right)^3},$$

con $x_{cus}^{e(h)} = x_{cus}^{e(h)} \mp x_i - W_s$, $n = \frac{\sin \phi_n^{e(h)}}{\sin \phi_p^{e(h)}}$; cuando $\phi_n^{e(h)} = 0$ se obtiene el punto máximo de extensión en x de la trayectoria cáustica, $x_{cus}^{e(h)} = -W_s n$ reemplazando este valor en $y^{e(h)}(x)$ según (5.14), se encuentra la trayectoria cáustica que se forman para electrones y huecos como

$$y_{caustica}^{e(h)} = \sqrt{\frac{\left((x_{cus}^{e(h)})^{2/3} - (x_{cus}^{e(h)})^{2/3} \right)^3}{(n^2 - 1)}},$$

con $x'^{e(h)} = (x - W_S \mp x_i)$. En el caso de la juntura *GSG* cuando $E_F^L = -E_F^S = 0,5\text{eV}$ y $E_F^R = 0,4\text{eV}$ el índice de refracción en la segunda interfase es $n = -E_F^R/E_F^L = -0,8$, por lo que se forma una cáustica como se muestra en la fig. 5.6 b, donde se grafican las probabilidades de transmisión T_{ee} y T_{eh} calculadas según (5.15) y (5.16) en función de x y y para $x > W_S$; en esta gráfica es posible identificar la cáustica para electrones y huecos, la primera muestra un punto cúspide más cercano a la interfase *SG*, debido a que el punto de origen se encuentra en este caso en $(W_S/2, 0)$. La cáustica para huecos tiene un punto cúspide más alejado de la interfase y se forma debido a la refracción de huecos que provienen de cuasipartículas tipo hueco del superconductor y no de una fuente, como si ocurre en el caso de los electrones. Para detalles acerca de la descripción de la cáustica y su dependencia con el índice de refracción ver [166].

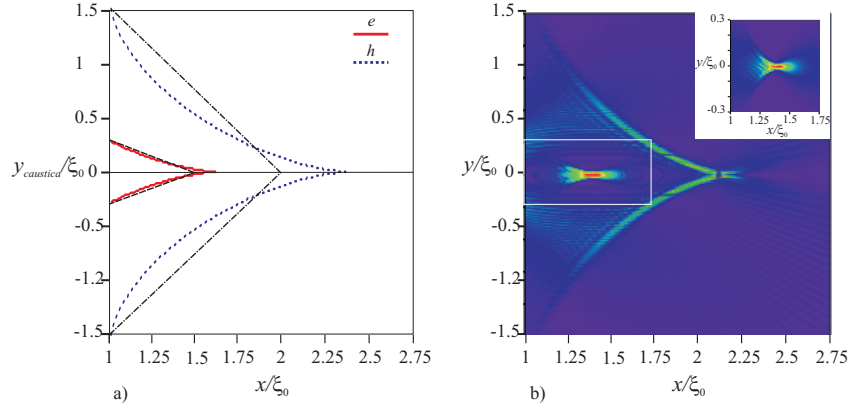


Fig. 5.6. Cáustica para la juntura *GSG*, a) Diagrama de la trayectoria $y_{caustica}$ para electrones y huecos comparada con las trayectorias para $n = -1$ para electrones y huecos. b) Probabilidad de transmisión T_{ee} y T_{eh} en x y y . La región ampliada corresponde a T_{ee} , $n = \frac{E_F^R}{E_F^L} = -0,8$ y la inyección de electrones se realiza en la región *L* en $(-0,5W_S, 0)$. Las ondas refractadas en la región derecha forman un patrón característico de interferencia mostrando curvas cáusticas cerca del punto cúspide.

Multiples reflexiones de Andreev

La analogía con las trayectorias clásicas pueden ser usadas también para explicar las múltiples reflexiones de Andreev que ocurren en la región superconductora; en este caso el tipo de partícula cambia y es reflejada en dirección opuesta a la incidente (retroreflexión de Andreev), cuando la nueva partícula incide en la interfase *SG*, ésta puede ser transmitida a la región normal *R* preservando el tipo de partícula como se vio en la sección anterior y contribuyendo al punto de focalización.

Los procesos dan lugar a una secuencia de focos de electrones y huecos los cuales se muestran en las fig. 5.7 a y b; en el primer caso (fig. 5.7 a), únicamente se presentan reflexiones normales que conservan el tipo de partícula las cuales producen una secuencia de focos sobre el eje óptico para electrones y huecos separados entre si una distancia $2W_S$, distancia que corresponde a la que recorre el rayo que representa la partícula en la región superconductora después de realizar dos reflexiones internas.

En la fig. 5.7 c, mostramos los resultados de la probabilidades de transmisión cuando la inyección de electrones se realiza en $(-W_S/2, 0)$; en este caso T_{ee} presenta un picos bien definidos en $x = (2m + \frac{3}{2}) W_S$ mientras que para T_{eh} los picos se presentan en $x = (2m + \frac{5}{2}) W_S$, con $m =$

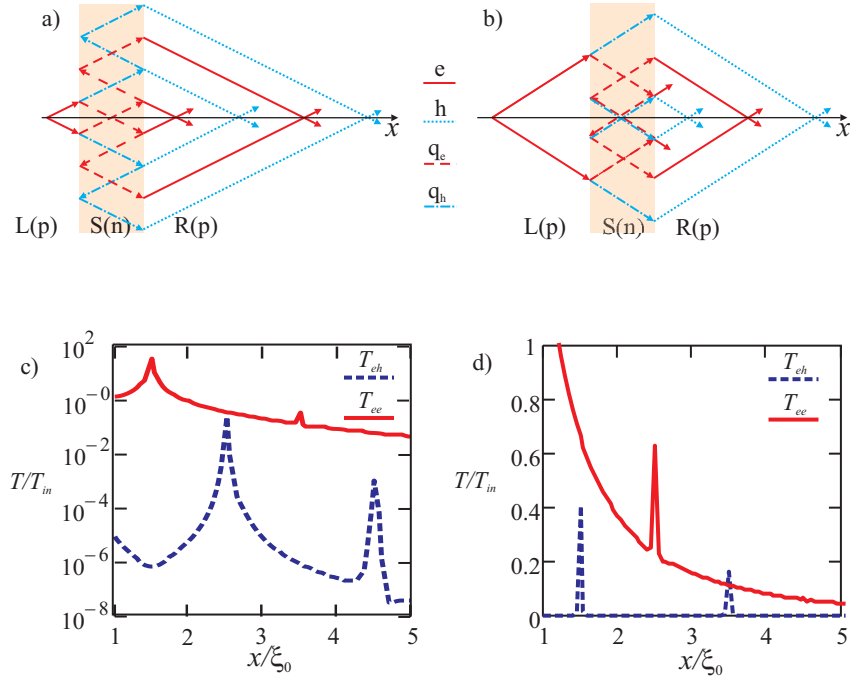


Fig. 5.7. Diagrama de las trayectorias clásicas de los electrones y huecos tomando en cuenta las múltiples reflexiones de Andreev en el superconductor, a) punto de inyección de los electrones en $(-0,5W_S, 0)$, b) punto de inyección de los electrones en $(-1,5W_S, 0)$, c) y d) Probabilidad de transmisión de electrones T_{ee} y huecos T_{eh} para $y = 0$ como función de x correspondiente a cada caso superior. El ancho del superconductor es $W_S = \xi$.

0, 1, 2.... La intensidad de estos picos de las probabilidades decae con la distancia a la interfase SG , los resultados se normalizan a la inyección de electrones dada por $T_{in} = T_{ee}(-W_S, 0)$. La intensidad del punto donde se enfocan los electrones es mucho mayor que la de los huecos, $T_{ee} \sim 100T_{eh}$, lo cual indica que la señal EC es mucho más alta que la CAR , sin embargo, la separación espacial entre los picos corresponde al ancho de la región superconductora, la cual es del orden de $1\mu m$, ésta separación permite la detección por separado de cada señal.

Al aumentar a una distancia mayor a W_S el punto de inyección de los electrones en la región L $|x_i| > W_S$, es posible identificar una contribución a los puntos de enfoque dada por una reflexión de Andreev en el superconductor; en la fig. 5.7 b la inyección de los electrones se realiza en $(-3W_S/2, 0)$, éstos después de dos reflexiones normales en las interfaces SG y GS se enfocan en la región R a una distancia de $x = 5W_S/2$. Las excitaciones electrónicas pueden tener una reflexión normal (en $x = W_S$) y posteriormente realizar una retroreflexión de Andreev (en $x = 0$) para convertirse en cuasipartículas q_h que se enfocan como huecos en $x = 3W_S/2$; a partir de las trayectorias clásicas podemos ver que las partículas viajan una cantidad horizontal extra de $2W_S$, lo cual reproduce exactamente la distancia recorrida por los huecos que se enfocan en $7W_S/2$ sin realizar una reflexión interna, en la fig. 5.7 d, mostramos T_{ee} y T_{eh} donde el pico para el segundo proceso de T_{eh} es mayor T_{ee} debido a las reflexiones internas.

5.2.2. Conductancia diferencial cruzada en la interfase grafeno - superconductor - grafeno

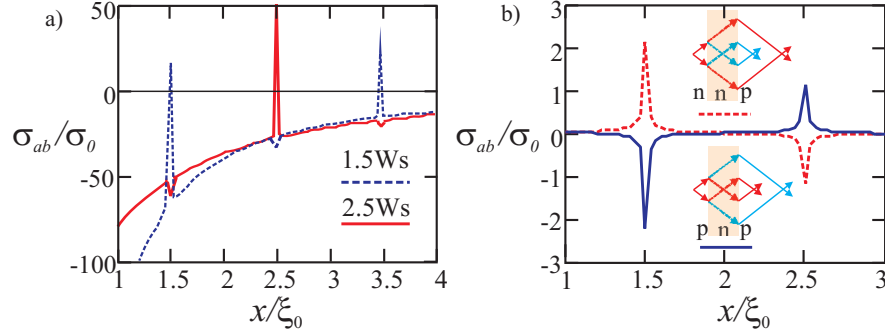


Fig. 5.8. Conductancia diferencial no local como una función de la distancia a la interfase x para, a) La juntura pnp considerando dos diferentes puntos de inyección de electrones en L . Los dopajes usados son $E_F^{L,R} = -E_F^S = 0.5eV$. b) Las junturas pnp y nnp . Los dopajes son $|E_F^{L,S,R}| = 0.5eV$ y la inyección de electrones es realizado en $d = -W_S/2$, considerando límite túnel con $t_{L,R} = 0.1$.

Cuando un voltaje V_b es aplicado entre los electrodos normales b y a la conductancia diferencial cruzada está dada por $\sigma_{ab} = dI_a/dV_b \propto (P_{CAR} - P_{EC})$, con $P_{CAR} = T_{eh}$ y $P_{EC} = T_{ee}$. Cuando $\sigma_{ab} > 0$ los procesos CAR predominan sobre los procesos EC , y si $P_{CAR} \gg P_{EC}$ este sistema puede ser usado como un sistema para desdoblar pares de Cooper. Para el caso de la juntura pnp , CAR y EC son focalizados en regiones espaciales distintas, pero $T_{eh} \ll T_{ee}$; con el animo de incrementar P_{CAR} con respecto a P_{EC} , es posible usar electrodos con magnetización antiparalela, lo cual puede ser difícil de manipular, otro camino para amplificar la señal CAR con respecto a EC es cambiar la posición de la fuente en el electrodo a , i.e. el punto de inyección de los electrones en la región L , en la fig. 5.8 a mostramos σ_{ab} cuando la inyección es realizada en $x = -1.5W_S$ (línea azul) y en $x = -2.5W_S$ (línea roja), donde como vemos en la fig. 5.7 a y b los picos de P_{EC} y P_{CAR} son alternados cuando la distancia de inyección con respecto a la interfase aumenta, en este caso CAR y EC se intercambian y la señal CAR es más intensa que EC . El signo de la conductancia depende del punto de inyección en el electrodo a , como se muestra en la fig. 5.8 a para una juntura pnp .

Por otro lado, si no modificamos la posición del punto de inyección pero consideramos ahora interfases no perfectas, en el límite túnel, las señales CAR y EC son del mismo orden de magnitud y se enfocan en diferentes puntos; en la fig. 5.8 b mostramos como la intensidad de la primera resonancia es prácticamente el doble de la segunda, ésto teniendo en cuenta que es posible cambiar el signo del dopaje de la región L , consiguiendo una juntura nnp , donde los puntos de focalización para CAR y EC son intercambiados con respecto a los de la juntura pnp (ver fig. 5.8 b); éste intercambio de trayectorias ocurre únicamente cuando $t_L \neq 1$, de lo contrario no se crearían cuasipartículas tipo hueco en el superconductor. Las diferentes posibilidades de manejo de las señales CAR y EC indican que puede ser posible tener control experimental sobre la señal en el electrodo b produciendo una fuente para el desdoblamiento de pares de Cooper.

Conclusiones

Las principales conclusiones de este trabajo son:

1. Analizamos la conductancia diferencial cruzada para una juntura *NISIN* cuando el parámetro de orden del superconductor puede tener simetrías s y $d_{x^2-y^2}$, encontrando que las probabilidades de dispersión electrón - electrón P_{EC} y de electrón - hueco P_{CAR} entre las dos regiones normales dependen de la simetría del parámetro de orden afectando la conductancia diferencial cruzada.
 - Para simetría s , encontramos que cuando el ancho del superconductor a es mayor ξ_0 y la energía de inyección de los electrones en el contacto normal izquierdo es $E < |\Delta_0|$, las probabilidades P_{CAR} y P_{EC} son de igual magnitud pero con un corrimiento de fase entre ellas y decaen exponencialmente según $\exp(-2a/\pi\xi)$, donde $\xi = \xi_0\Delta_0/(|\Delta_0|^2 - E^2)^{1/2}$ representa una longitud de coherencia efectiva.
 - Para simetría $d_{x^2-y^2}$ existe una contribución de cuasipartículas debidas a estados con energía menor a $\Delta(\theta)$ donde $\xi > \xi_0$, por lo que el decrecimiento de P_{CAR} y P_{EC} con el ancho del superconductor a es menor en comparación con el decrecimiento para simetrías s ; adicionalmente, P_{EC} es en promedio mayor que P_{CAR} por lo que la conductancia σ_{LR} es negativa. Considerando las regiones normales con magnetización antiparalela obtenemos el predominio del proceso *CAR* sobre *EC*; éstos resultados pueden ser relevantes al proponer montajes experimentales para estudiar procesos relacionados con *CAR* en cupratos.
2. Considerando un sistema compuesto por dos contactos normales sobre un superconductor semi - infinito con base en Fe , encontramos que la conductancia diferencial cruzada depende de la simetría del parámetro de orden del superconductor. En un modelo de dos bandas caracterizadas cada una por un potencial de pares Δ_1 y Δ_2 que se mezclan utilizando un parámetro adimensional α , las simetrías del potencial de pares del superconductor con base en Fe pueden ser s_{+-} , para la cual cada banda tienen una simetría tipo s pero con una diferencia de fase de π entre las dos o s_{++} cuando la diferencia de

fase es cero; estudiamos la dependencia con α y con el parámetro de acople t entre los contactos y el superconductor, de la conductancia diferencial no local, encontrando que

- En el límite túnel para $eV = 0$ y simetría s_{++} , la conductancia diferencial cruzada decae exponencialmente con la distancia entre los contactos normales L , además la conductancia en este caso toma valores positivos y negativos lo que indica que las probabilidades de dispersiones P_{CAR} y P_{EC} son comparables. Cuando la energía de incidencia de los electrones toma un valor en un rango dado por $\Delta_2 < E < \Delta_1$, encontramos que las CAR predominan para valores de L menores a $2\xi_0$.
 - Para simetría s_{+-} con las mismas consideraciones tomadas para la simetría s_{++} , la conductancia diferencial cruzada decae con la distancia entre los contactos. Para valores de $\alpha = 1$ observamos un aumento en las dispersiones tipo EC , por lo que la conductancia diferencial cruzada toma valores negativos. Para un valor de energía entre los dos potenciales y simetría s_{+-} la dispersión EC predomina. Los resultados para la conductancia cruzada en sistemas de superconductores multibandas y usando contactos puntuales son un aporte de este trabajo.
3. Analizamos la corriente eléctrica y la conductancia diferencial en una interfase grafeno - superconductor GS con fronteras “armchair” y “zigzag”, encontrando que la conductancia diferencial depende de las probabilidades de reflexión electrón - electrón R_{ee} y electrón - hueco R_{eh} y presenta distintos comportamientos dependiendo del dopaje del grafeno E_{FG} , el tipo de frontera en la interfase y el parámetro de acople t entre las dos regiones.
- Para energías $E < E_{FG}$, las dispersiones de electrón - hueco se comportan como en un superconductor convencional, i.e., son intrabanda y retroreflejadas, mientras que para $E > E_{FG}$ las reflexiones de Andreev son especulares. Cuando $E = E_{FG}$ el electrón incidente es reflejado como un hueco en el punto de Dirac con probabilidad cero, con lo cual la conductancia diferencial es igual a cero cuando $eV = E_{FG}$.
 - En un segundo rango de dopajes $E_{FG} > \Delta$ la conductancia no se anula en $eV = E_{FG}$, ésto debido a la transmisión de cuasipartículas. A medida que el dopaje aumenta el comportamiento de los coeficientes corresponde al de la juntura NS , donde para $eV < \Delta$ el coeficiente $R_A = 1$ y por lo tanto $R_{ee} = 0$.
 - Cuando $|eV| \gg \Delta$, la conductancia diferencial disminuye más rápidamente con el voltaje para la incidencia de huecos en comparación con la incidencia de electrones, esto puede entenderse al analizar la densidad de estados, a medida que el dopaje tiende a cero la densidad de estados es más simétrica respecto al voltaje así como la conductancia.
 - Para distinguir el efecto de la frontera es necesario considerar un acople entre el grafeno y el superconductor $t \neq 1$, para el cual encontramos que la conductancia disminuye, esto ocurre independientemente del dopaje y del tipo de frontera; sin embargo, al disminuir t la conductancia diferencial para frontera “zigzag” disminuye más que para “armchair”, ésto debido a que cuando $t \neq 1$ para la frontera “armchair” se abre un canal de dispersión adicional debido al acople entre los valles que no se presenta para la frontera “zigzag” donde no hay dispersión de cuasipartículas entre los dos valles \mathbf{K} y \mathbf{K}' .

- Analizamos el caso de la juntura p - n (energías de Fermi del grafeno y el superconductor con signo opuesto), donde la conductancia diferencial disminuye cuando el acople t se reduce de igual forma que en el caso de la juntura p - p . Para dopajes bajos y diferentes valores de t la juntura p - n presenta el mismo comportamiento que la juntura n - n si hacemos $eV \rightarrow -eV$.
 - Para dopajes altos en la juntura p - n , la diferencia entre las energías de Fermi de cada región $E_{FS} - E_{FG} = 2E_{FS}$ representa una barrera de potencial que produce que la conductancia diferencial disminuya para $|eV| < \Delta$, pero no sea nula; ésto debido a la paradoja de Klein ya que de lo contrario solo habrían reflexiones electrón - electrón producidas por la barrera de potencial.
4. Desarrollamos un modelo teórico para encontrar la corriente eléctrica y la conductancia diferencial para una juntura $GG'S$ con G' una película de grafeno; a partir de ésta encontramos que la conductancia diferencial presenta resonancias al variar el voltaje, las cuales se presentan debido a la formación de estados cuasiligados en la región G' y dependen del tipo de frontera “armchair” o “zigzag”, del parámetro de acople entre las interfases, del ancho y dopaje de la película; adicionalmente, el modelo teórico nos permite también analizar los efectos que sobre la conductancia diferencial del sistema tienen la paradoja de Klein, cuando G' es considerada como una barrera de potencial.
- Considerando parámetros de acople al lado izquierdo $t_L = 1$ y derecho $t_R = 0,1$; para frontera “armchair” encontramos que al disminuir el acople con el superconductor se eliminan las resonancia en la conductancia diferencial para $|eV| < \Delta$ y para frontera “zigzag” se presenta una resonancia para $-eV = E_{FG'}$ debida al estado superficial que se forma en la interfase GG' , los máximos en la conductancia diferencial corresponden a los observados en la densidad de estados de G' .
 - Para $t_L = 0,1$ y $t_R = 1$, aparece un espectro bien definido debido a multiples reflexiones de Andreev dentro de la película, que forma un conjunto de niveles denominado niveles de Andreev; éstos estados producen resonancias en la conductancia diferencial con respecto al voltaje para dopajes bajos y altos de la película de grafeno. Para dopajes altos, se distingue que la energía para la cual aparecen las resonancias es similar para los dos tipos de fronteras, en el caso de dopajes bajos la conductancia presenta resonancias que corresponden a los niveles de energía que aparecen en la juntura $GG'S$. Se encuentra también una resonancia en $-eV = E_{FG'}$ para la frontera “zigzag”.
 - Cuando comparamos la densidad de estados y la conductancia diferencial para los dos tipos de frontera, encontramos que la energía para la cual aparecen los estados y el número de éstos depende del tipo de frontera; encontrando que para la frontera “armchair” el número de estados es mayor, mientras que para frontera “zigzag” la resonancia en la conductancia para $-eV = E_{FG'}$ corresponde a la encontrada en la densidad de estados.
 - Cuando disminuye el acople con el superconductor la conductancia diferencial disminuye y el número de resonancias es menor, hasta llegar a ser prácticamente nulo ya que no se presentan niveles de Andreev; ésto indica que el aumento en el valor del parámetro de acople aumenta la probabilidad de que dispersiones de Andreev ocurran creando un mayor número de niveles de energía.

- Al variar el ancho de la película de grafeno se produce un aumento en el número de resonancias en la conductancia diferencial; éste comportamiento se observa también en la densidad de estados de la juntura $GG'S$, e indica que a medida que el ancho G' aumenta permite que un mayor número de niveles de Andreev aparezcan, disminuyendo la diferencia entre los niveles de energía.
 - Cuando el ancho de la película G' es mucho menor que la longitud de coherencia y el dopaje mucho mayor que Δ , la película se comporta como una barrera de potencial con fortaleza proporcional al ancho de la película W y al potencial $V_0 = E_{FG'}$. Considerando la barrera y $t_L = t_R = 1$ la conductancia diferencial para la juntura con fronteras “zigzag” y “armchair” presenta un comportamiento periódico con la variación de la fortaleza cuyo periodo es π , debido a la paradoja de Klein; cuando $t_{L(R)} \neq 1$ la periodicidad se rompe para dopajes altos y la conductancia diferencial para fronteras “armchair” y “zigzag” es diferente.
5. Analizamos la conductancia diferencial cruzada para un sistema G_LSG_R con dopajes tales que se forma una juntura pnp o nnp , para la cual el sistema puede ser considerado como una lente con índice de refracción negativo que enfoca electrones que inciden sobre la región G_L como electrones y huecos en la región G_R , lo cual permite enfocar reflexiones de Andreev no locales.
- Para hacer una analogía con la óptica clásica determinamos la probabilidad de que un electrón que incide desde el grafeno en la región izquierda, pueda ser transmitido como electrón o como hueco a la región derecha; para esto describimos los vectores de onda y las velocidades de las partículas que dependen del signo del dopaje de cada región y determinan las trayectorias clásicas de las partículas cumpliendo con la ley de Snell.
 - Encontramos la conductancia diferencial cruzada en la juntura G_LSG_R a partir de las probabilidades de transmisión electrón - electrón T_{ee} y electrón - hueco T_{eh} ; las probabilidades de transmisión presentan resonancias alternadas entre si y bien definidas que corresponden a los puntos de enfoque de electrones y huecos, con $T_{ee} \sim 100T_{eh}$, lo cual indica que la señal EC es mucho más alta que la CAR cuando el punto de inyección está en $(-W_S/2, 0)$. La señal CAR aumenta a medida que se amplía la distancia entre la interfase G_LS y el punto de inyección; esto debido a que se presentan reflexiones internas en el superconductor que refuerzan los procesos relacionados con T_{eh} , en este caso las CAR que se enfocan cerca de la región superconductora son mucho mayores que el EC y la conductancia diferencial cruzada es positiva.
 - En el límite túnel las señales CAR y EC son comparables y la conductancia diferencial alterna entre valores positivos o negativos, dependiendo de la ubicación de la punta de prueba para medir la conductancia diferencial cruzada.
 - La separación espacial entre las resonancias corresponde al ancho de la región superconductora, la cual es del orden de $1\mu m$, esta separación permite la detección por separado de cada señal.
 - Para una juntura nnp e interfases no perfectas, los puntos de focalización para CAR y EC son intercambiados con respecto a los de la juntura pnp ; éste intercambio de trayectorias ocurre únicamente cuando $t_L \neq 1$. Las diferentes posibilidades de manejo

de las señales CAR y EC indican que puede ser posible tener control experimental sobre el punto dónde se enfoca cada tipo de dispersión.

6. El análisis de las probabilidades CAR en los diferentes sistemas estudiados en este trabajo puede ser útil para la generación de electrones entrelazados usando superconductores de alta temperatura crítica o junturas que involucren regiones superconductoras y grafeno como GSG .

Perspectivas

Con base en el trabajo realizado es posible profundizar en algunos temas que pueden ser estudiados a partir de las expresiones generales encontradas o siguiendo metodologías similares, entre estos temas se encuentran:

- El estudio de la conductancia diferencial cruzada para sistemas con cupratos considerando simetrías compuestas como $d+is$ y en sistemas con base en grafeno, considerando junturas conformadas por nanotubos de carbono o contactos cuánticos.
- Encontrar y analizar el ruido de emisión entre corrientes del mismo contacto o entre corrientes de diferentes contactos en sistemas $NIS'IN$, con S' superconductor con base e Fe .
- A partir de los estudios de la conductancia diferencial en junturas $GG'S$ estudiar el efecto Josephson cuando se considera la región G como un superconductor.
- Encontrar los efectos que sobre las propiedades de transporte puede tener la consideración de defectos en las estructuras de Grafeno.

Durante la realización de esta investigación se elaboraron las siguientes publicaciones

- S. Gómez, W. Herrera, J. Niño, and D. Manjarrés, *Crossed Andreev reflection in superconducting junctions*, *Microelectronics J.* **39** (2008) 1231.
- D. Manjarrés, W. Herrera, and S. Gómez, *Andreev levels in a graphene-superconductor surface*, *Physica B* **404** (2009) 2799.
- S. Gómez, W. Herrera, and J. Niño, *Study of transport properties in superconducting junctions of double insulating barrier*, *Physica B* **404** (2009) 2787.
- S. Gómez, P. Burset, W. Herrera, and A. Levy Yeyati, *Selective focusing of electrons and holes in a graphene-based superconducting lens*, *Phys. Rev B* **85**, (2012) 115411.

Soluciones para las ecuaciones de BdG en la junta NISIN

Reemplazando las soluciones (2.4), (2.5) y (2.10) en las ecuaciones para las condiciones de frontera (2.8) y (2.9) los coeficientes pueden ser escritos de la forma

$$U_1 + U_2 = (C_+^+ + C_-^+) u_0 + (C_+^- + C_-^-) v_0 \quad (\text{A.1})$$

$$V_1 = (C_+^+ e^{-i\varphi_+} + C_-^+ e^{-i\varphi_-}) v_0 \quad (\text{A.2})$$

$$+ (C_+^- e^{-i\varphi_+} + C_-^- e^{-i\varphi_-}) u_0 \quad (\text{A.3})$$

$$(1 - 2iZ_1) U_1 - (1 + 2iZ_1) U_2 = (C_+^+ - C_-^+) u_0 + (C_+^- - C_-^-) v_0 \quad (\text{A.4})$$

$$(1 - 2iZ_1) V_1 = (C_+^+ e^{-i\varphi_+} - C_-^+ e^{-i\varphi_-}) v_0 \quad (\text{A.5})$$

$$+ (C_+^- e^{-i\varphi_+} - C_-^- e^{-i\varphi_-}) u_0 \quad (\text{A.6})$$

$$U_3 e^{ik^+ a} = (C_+^+ e^{ik^+ a} + C_-^+ e^{-ik^+ a}) u_0 \quad (\text{A.7})$$

$$+ (C_+^- e^{ik^- a} + C_-^- e^{-ik^- a}) v_0 \quad (\text{A.8})$$

$$V_2 e^{-ik^- a} = (C_+^+ e^{ik^+ a} e^{-i\varphi_+} + C_-^+ e^{-ik^+ a} e^{-i\varphi_-}) v_0 \quad (\text{A.9})$$

$$+ (C_+^- e^{ik^- a} e^{-i\varphi_+} + C_-^- e^{-ik^- a} e^{-i\varphi_-}) u_0 \quad (\text{A.10})$$

$$(1 + 2iZ_2) U_3 e^{ik^+ a} = (C_+^+ e^{ik^+ a} - C_-^+ e^{-ik^+ a}) u_0 \quad (\text{A.11})$$

$$+ (C_+^- e^{ik^- a} - C_-^- e^{-ik^- a}) v_0 \quad (\text{A.12})$$

$$- (1 - 2iZ_2) V_2 e^{-ik^- a} = (C_+^+ e^{ik^+ a} e^{-i\varphi_+} - C_-^+ e^{-ik^+ a} e^{-i\varphi_-}) v_0 \quad (\text{A.13})$$

$$+ (C_+^- e^{ik^- a} e^{-i\varphi_+} - C_-^- e^{-ik^- a} e^{-i\varphi_-}) u_0 \quad (\text{A.14})$$

Considerando que $|\Delta_+| = |\Delta_-| = \Delta$, $k_+^+ \approx k_-^+ \approx k^+$, $k_+^- \approx k_-^- \approx k^-$, $\frac{m\gamma_{1,2}}{k\hbar^2} = Z_{1,2}$.

(A.1) + (A.4)

$$U_1 (1 - iZ_1) - U_2 iZ = C_+^+ u_0 + C_+^- v_0 \quad (\text{A.15})$$

(A.1) - (A.4)

$$U_1 iZ_1 + U_2 (1 + iZ_1) = C_-^+ u_0 + C_-^- v_0 \quad (\text{A.16})$$

(A.2) + (A.5)

$$(1 - iZ_1) V_1 = C_+^+ e^{-i\varphi_+} u_0 + C_+^- e^{-i\varphi_+} v_0 \quad (\text{A.17})$$

(A.2) - (A.5)

$$iZ_1 V_1 = C_-^+ e^{-i\varphi_-} v_0 + C_-^- e^{-i\varphi_-} v_0 \quad (\text{A.18})$$

(A.7) + (A.11)

$$(1 + iZ_2) U_3 e^{ik^+ a} = C_+^+ e^{ik^+ a} u_0 + C_+^- e^{ik^- a} v_0 \quad (\text{A.19})$$

(A.7) - (A.11)

$$-iZ_2 U_3 e^{ik^+ a} = C_-^+ e^{-ik^+ a} u_0 + C_-^- e^{-ik^- a} v_0 \quad (\text{A.20})$$

(A.9) + (A.13)

$$iZ_2 V_2 e^{-ik^- a} = C_+^+ e^{ik^+ a} e^{-i\varphi_+} v_0 + C_+^- e^{ik^- a} e^{-i\varphi_+} u_0 \quad (\text{A.21})$$

(A.9) - (A.13)

$$(1 - iZ_2) V_2 e^{-ik^- a} = C_-^+ e^{-ik^+ a} e^{-i\varphi_-} v_0 + C_-^- e^{-ik^- a} e^{-i\varphi_-} u_0 \quad (\text{A.22})$$

$(1 + iZ_1) \times (\text{A.15}) + iZ_1 \times (\text{A.16})$

$$U_1 = (1 + iZ_1) (C_+^+ u_0 + C_+^- v_0) + iZ_1 (C_-^+ u_0 + C_-^- v_0) \quad (\text{A.23})$$

$iZ_1 \times (\text{A.15}) - (1 - iZ_1) \times (\text{A.16})$

$$-U_2 = iZ_1 (C_+^+ u_0 + C_+^- v_0) - (1 - iZ_1) (C_-^+ u_0 + C_-^- v_0) \quad (\text{A.24})$$

$(1 + iZ_1) \times (\text{A.17}) + iZ_1 \times (\text{A.18})$

$$V_1 = (1 + iZ_1) (C_+^+ e^{-i\varphi_+} v_0 + C_+^- e^{-i\varphi_+} u_0) + iZ_1 (C_-^+ e^{-i\varphi_-} v_0 + C_-^- e^{-i\varphi_-} u_0) \quad (\text{A.25})$$

$iZ_1 \times (\text{A.17}) - (1 - iZ_1) \times (\text{A.18})$

$$0 = iZ_1 (C_+^+ e^{-i\varphi_+} v_0 + C_+^- e^{-i\varphi_+} u_0) - (1 - iZ_1) (C_-^+ e^{-i\varphi_-} v_0 + C_-^- e^{-i\varphi_-} u_0) \quad (\text{A.26})$$

$iZ_2 \times (\text{A.19}) + (1 + iZ_2) \times (\text{A.20})$

$$0 = iZ_2 (C_+^+ e^{ik^+ a} u_0 + C_+^- e^{ik^- a} v_0) + (1 + iZ_2) (C_-^+ e^{-ik^+ a} u_0 + C_-^- e^{-ik^- a} v_0) \quad (\text{A.27})$$

$(1 - iZ_2) \times (\text{A.19}) - iZ_2 \times (\text{A.20})$

$$U_3 e^{ik^+ a} = (1 - iZ_2) (C_+^+ e^{ik^+ a} u_0 + C_+^- e^{ik^- a} v_0) - iZ_2 (C_-^+ e^{-ik^+ a} u_0 + C_-^- e^{-ik^- a} v_0) \quad (\text{A.28})$$

$iZ_2 \times (\text{A.21}) + (1 + iZ_2) \times (\text{A.22})$

$$V_2 e^{-ik^- a} = iZ_2 (C_+^+ e^{ik^+ a} e^{-i\varphi_+} v_0 + C_+^- e^{ik^- a} e^{-i\varphi_+} u_0) \quad (\text{A.29})$$

$$+ (1 + iZ_2) (C_-^+ e^{-ik^+ a} e^{-i\varphi_-} v_0 + C_-^- e^{-ik^- a} e^{-i\varphi_-} u_0) \quad (\text{A.30})$$

$$(1 - iZ_2) \times (\text{A.21}) - iZ_2 \times (\text{A.22})$$

$$0 = (1 - iZ_2) \left(C_+^+ e^{ik^+a} e^{-i\varphi_+} v_0 + C_+^- e^{ik^-a} e^{-i\varphi_+} u_0 \right) \quad (\text{A.31})$$

$$-iZ_2 \left(C_-^+ e^{-ik^+a} e^{-i\varphi_-} v_0 + C_-^- e^{-ik^-a} e^{-i\varphi_-} u_0 \right) \quad (\text{A.32})$$

A partir de (A.26) se encuentra

$$C_-^- = \frac{iZ_1 e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)}}{u_0 (1 - iZ_1)} (C_+^+ v_0 + C_+^- u_0) - C_-^+ \frac{v_0}{u_0} \quad (\text{A.33})$$

Reemplazando (A.33) en (A.27) se encuentra

$$C_-^+ = -\frac{iZ}{(1 + Z^2) (u_0^2 e^{-ik^+a} - e^{-ik^-a} v_0^2)} \quad (\text{A.34})$$

$$\left[C_+^+ \left(e^{ik^+a} u_0^2 (1 - iZ) + e^{-ik^-a} v_0^2 (1 + iZ) e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} \right) \right. \\ \left. + C_+^- u_0 v_0 \left(e^{ik^-a} (1 - iZ) + e^{-ik^+a} (1 + iZ) e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} \right) \right] \quad (\text{A.35})$$

donde consideramos $Z_1 = Z_2 = Z$.

Reemplazando (A.34) en (A.33) se encuentra

$$C_-^- = -\frac{iZ}{(1 + Z^2) (u_0^2 - e^{i(k^+ - k^-)a} v_0^2)} \quad (\text{A.36})$$

$$\left[C_+^+ v_0 u_0 \left(e^{2ik^+a} (1 - iZ) + (1 + iZ) e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} \right) \right. \\ \left. + C_+^- \left(e^{i(k^+ - k^-)a} v_0^2 (1 - iZ) + (1 + iZ) u_0^2 e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} \right) \right] \quad (\text{A.37})$$

Reemplazando (A.36) y (A.34) en (A.31) se obtiene

$$C_+^- = -C_+^+ \frac{e^{ik^+a} (1 - iZ) (Z^2 Q - \Gamma (1 + Z^2) e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)}) - Z^2 (1 + iZ) e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} e^{-ik^-a} \Gamma (1 - \Gamma Q)}{e^{ik^-a} (1 - iZ) (Z^2 \Gamma Q - (1 + Z^2) e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)}) - Z^2 (1 + iZ) e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} e^{-ik^-a} (1 - \Gamma Q)} \quad (\text{A.38})$$

donde

$$\Gamma = \frac{v_0}{u_0}, \quad Q = \frac{\Gamma (1 - e^{i(k^+ - k^-)a})}{(1 - e^{i(k^+ - k^-)a} \Gamma^2)}$$

Reemplazando (A.34) y (A.36) en (A.23)

$$U_1 = \frac{u_0}{(1 + Z^2)} \quad (\text{A.39})$$

$$\left[C_+^+ (Z^2 (1 - iZ) e^{2ik^+a} (1 - \Gamma Q) + (1 + iZ) ((1 + Z^2) - Z^2 e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} \Gamma Q)) \right. \\ \left. + C_+^- (Z^2 (1 - iZ) e^{i(k^+ + k^-)a} \Gamma (1 - \Gamma Q) + (1 + iZ) (\Gamma (1 + Z^2) - Z^2 e^{-i(\varphi_+ - \varphi_-)} Q)) \right] \quad (\text{A.40})$$

Reemplazando (A.34) y (A.36) en (A.24)

$$U_2 = -\frac{iZ u_0}{1+iZ} [C_+^+((1+iZ)(1-e^{-i(\varphi_+-\varphi_-)}\Gamma Q) + (1-iZ)e^{2ik^+a}(1-\Gamma Q)) \\ + C_+^-((1+iZ)(\Gamma - e^{-i(\varphi_+-\varphi_-)}Q) + (1-iZ)e^{i(k^++k^-)a}\Gamma(1-\Gamma Q))] \quad (\text{A.41})$$

Reemplazando (A.34) y (A.36) en (A.25)

$$V_1 = \frac{u_0 e^{-i\varphi_+}}{(1-iZ)} [C_+^+ \Gamma + C_+^-] \quad (\text{A.42})$$

Reemplazando (A.34) y (A.36) en (A.28)

$$U_3 = \frac{u_0 e^{-i(k_+-k^+)a}}{(1+iZ)} [C_+^+ + C_+^- \Gamma e^{-i(k^+-k^-)a}] \quad (\text{A.43})$$

Reemplazando (A.34) y (A.36) en (A.29)

$$V_2 = -\frac{iZ u_0 e^{-i\varphi_-} e^{i(k_-+k^+)a}}{(1-iZ)} \quad (\text{A.44}) \\ [C_+^+((1-iZ)e^{ik^+a}(\Gamma e^{-i(\varphi_+-\varphi_-)} - Q) + e^{-ik^-a}e^{-i(\varphi_+-\varphi_-)}\Gamma(1-\Gamma Q)(1+iZ)) \\ + C_+^-((1-iZ)e^{ik^-a}(e^{-i(\varphi_+-\varphi_-)} - \Gamma Q) + e^{-i(\varphi_+-\varphi_-)}e^{-k^-a}(1-\Gamma Q)(1+iZ))]]$$

Amplitudes de reflexión para fronteras “armchair” y “zigzag”

B.1. Frontera “armchair”

Verificación de las condiciones de frontera cuando se considera una función de Green para una película de grafeno, teniendo en cuenta que para este tipo de fronteras la primera derivada de la función de onda debe anularse en la superficie $x = 0$ y $x = -W$

$$\Phi'(x) = iK e^{iKx} \phi'_+(x) - iK e^{-iKx} \phi'_-(x) \quad (\text{B.1})$$

$$\phi'_{L(R)}(x) = \mp i k e^{\mp i k x} \varphi_{1(2)} \pm i k r_{L(R)}^{\pm} e^{\pm i k x} \varphi_{2(1)} \quad (\text{B.2})$$

$$\phi'_{L(R)}(x) = \mp i k e^{\mp i k x} \varphi_{2(1)} \pm i k r_{L(R)}^{\pm} e^{\pm i k x} \varphi_{1(2)} \quad (\text{B.3})$$

incidiendo por la derecha $x = x_R$ la solución de las ecuaciones de *BdGD* es

$$\Phi'(x) = i(K+k) \left(e^{i(K+k)x} - r_R^- e^{-i(K+k)x} \right) \varphi_2 + i(K-k) \left(r_R^+ e^{i(K-k)x} - e^{-i(K-k)x} \right) \varphi_1 \quad (\text{B.4})$$

Cuando $\Phi'(x_R) = 0$ el sistema de ecuaciones a solucionar es

$$\begin{aligned} & (K+k) \left(e^{i(K+k)x_R} - r_R^- e^{-i(K+k)x_R} \right) e^{i\alpha/2} \\ & + (K-k) \left(r_R^+ e^{i(K-k)x_R} - e^{-i(K-k)x_R} \right) e^{-i\alpha/2} = 0 \\ & - (K+k) \left(e^{i(K+k)x_R} - r_R^- e^{-i(K+k)x_R} \right) e^{-i\alpha/2} \\ & + (K-k) \left(r_R^+ e^{i(K-k)x_R} - e^{-i(K-k)x_R} \right) e^{i\alpha/2} = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

con el cual los coeficientes de reflexión son

$$\begin{aligned} r_R^+ &= e^{-2i(K-k)x_R} \\ r_R^- &= e^{2i(K+k)x_R} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Cuando incide desde la izquierda $x = x_L$ la solución de las ecuaciones de *BdGD* es

$$\Phi'(x) = i(K-k) \left(e^{i(K-k)x} - r_L^- e^{-i(K-k)x} \right) \varphi_1 + i(K+k) \left(r_L^+ e^{i(K+k)x} - e^{-i(K+k)x} \right) \varphi_2 \quad (\text{B.7})$$

Cuando $\Phi'(x_L) = 0$ el sistema de ecuaciones a solucionar es

$$\begin{aligned}
(K-k) \left(e^{i(K-k)x_L} - r_L^- e^{-i(K-k)x_L} \right) e^{-i\alpha/2} + (K+k) \left(r_L^+ e^{i(K+k)x_L} - e^{-i(K+k)x_L} \right) e^{i\alpha/2} &= 0 \\
(K-k) \left(e^{i(K-k)x_L} - r_L^- e^{-i(K-k)x_L} \right) e^{i\alpha/2} - (K+k) \left(r_L^+ e^{i(K+k)x_L} - e^{-i(K+k)x_L} \right) e^{-i\alpha/2} &= 0
\end{aligned} \tag{B.8}$$

de las cuales los coeficientes de reflexión son

$$\begin{aligned}
r_L^+ &= e^{-2i(K+k)x_L} \\
r_L^- &= e^{2i(K-k)x_L}
\end{aligned} \tag{B.9}$$

B.2. Frontera “zigzag”

Las funciones de onda asintóticas para una frontera “zigzag” son

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= e^{-ikx} \varphi_2 + r_L e^{ikx} \varphi_1 \\
\psi_2 &= e^{ikx} \varphi_1 + r_R e^{-ikx} \varphi_2
\end{aligned}$$

con

$$\varphi_1 = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} \\ e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}, \varphi_2 = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} \\ -e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \tag{B.10}$$

En la frontera las funciones se hacen cero y los coeficientes de reflexión se pueden encontrar como

$$\begin{aligned}
0 &= e^{-ikx} \varphi_2 + r_L e^{ikx} \varphi_1 \\
0 &= e^{ikx} \varphi_1 + r_R e^{-ikx} \varphi_2
\end{aligned}$$

Los coeficientes son entonces

$$\begin{aligned}
r_L^A &= \mp e^{i\alpha} e^{-2ikx_L}, \quad r_R^A = \mp e^{-i\alpha} e^{2ikx_R} \\
r_L^B &= \pm e^{-i\alpha} e^{-2ikx_L}, \quad r_R^B = \pm e^{i\alpha} e^{2ikx_R}
\end{aligned}$$

Función de Green para la juntura grafeno - superconductor

C.1. Frontera “armchair”

Para la función de Green fuera del equilibrio a la derecha del acople G_{RR}

La ecuación de Dyson puede escribirse como

$$G(x, x') = g(x, x') + g(x, 0^+) \Sigma_{RL} G(-0^-, x') \quad (C.1)$$

Para encontrar $G(x, x')$ es necesario escribir la función de Green $G(-0^-, x')$ de la forma

$$G(-0^-, x') = g(-0^-, -0^-) \Sigma_{LR} G(0^+, x') \quad (C.2)$$

está a su vez depende de $G(0^+, x')$ que puede ser escrita como

$$G(0^+, x') = g(0^+, x') + g(0^+, 0^+) \Sigma_{RL} G(-0^-, x') \quad (C.3)$$

reemplazando está en (C.2) se encuentra

$$G(-0^-, x') = (g^{-1}(-0^-, -0^-) - g(-0^-, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^+) \Sigma_{RL})^{-1} \Sigma_{LR} g(0^+, x') \quad (C.4)$$

con este resultado finalmente la ecuación de Dyson (C.1) es

$$G(x, x') = g(x, x') + g(x, 0^+) \Sigma_{RL} \left(g^{-1}(-0^-, -0^-) - g(-0^-, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^+) \Sigma_{RL} \right)^{-1} \Sigma_{LR} g(0^+, x') \quad (C.5)$$

Para la función fuera del equilibrio a la derecha del acople G_{RL}

La ecuación de Dyson es

$$G(x, x') = g(x, 0^+) \Sigma_{RL} G(-0^-, x') \quad (C.6)$$

En este caso la función $G(-0^-, x')$ es

$$G(-0^-, x') = g(-0^-, x') + g(-0^-, -0^-) \Sigma_{LR} G(0^+, x') \quad (C.7)$$

la cual depende de $G(0^+, x')$ que es

$$G(0^+, x') = g(0^+, 0^+) \Sigma_{RL} G(-0^-, x') \quad (\text{C.8})$$

reemplazando esté en (C.7) se encuentra

$$G(-0^-, x') = \left(I - g(-0^-, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^+) \Sigma_{RL} \right)^{-1} g(-0^-, x') \quad (\text{C.9})$$

reemplazando este resultado en (C.6) la ecuación de Dyson es

$$G(x, x') = g(x, 0^+) \Sigma_{RL} \left(I - g(-0^-, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^+) \Sigma_{RL} \right)^{-1} g(-0^-, x') \quad (\text{C.10})$$

C.2. Frontera “zigzag”

Para la función de Green fuera del equilibrio a la derecha del acople G_{RR}

La ecuación de Dyson puede escribirse como

$$G(x, x') = g(x, x') + g(x, 0^-) \Sigma_{RL} G(-0^+, x') \quad (\text{C.11})$$

Para encontrar $G(x, x')$ es necesario escribir la función de Green $G(-0^+, x')$ de la forma

$$G(-0^+, x') = g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} G(0^+, x') \quad (\text{C.12})$$

está a su vez depende de $G(0^+, x')$ que puede ser escrita como

$$G(0^+, x') = g(0^+, x') + g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} G(-0^+, x') \quad (\text{C.13})$$

reemplazando $G(0^+, x')$ en $G(-0^+, x')$ se encuentra

$$G(-0^+, x') = \left(I - g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} \right)^{-1} g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, x') \quad (\text{C.14})$$

reemplazando este resultado en $G(x, x')$ la ecuación de Dyson puede escribirse como

$$G_{RR}(x, x') = g(x, x') + g(x, 0^-) \Sigma_{RL} \left[I - g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} \right]^{-1} g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, x') \quad (\text{C.15})$$

con $g^>(x, 0^-)$, para $x > x'$,

$g^<(0^+, x')$, para $x < x'$,

$g^>(0^+, 0^-)$ para $x > x'$

y $g^<(-0^+, -0^-)$ para $x < x'$

en este caso la autoenergía es $\Sigma_{RL} = t\tau_1$ y $\Sigma_{LR} = t\tau_1^T$, con

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.16})$$

La función de Green en este caso se escribe como

$$G_{RR}(x, x') = g(x, x') + t^2 g^>(x, 0^-) \tau_1 M_R^{zz} g^<(-0^+, -0^-) \tau_1^T g^<(0^+, x') \quad (\text{C.17})$$

con

$$M_R^{zz} = \frac{1}{D_R} \begin{pmatrix} D_R t^2 \left((E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1) - e^{i\alpha_h^G} t^2 (E_2^2 - E_1^2) \right) & 0 & -t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \\ 0 & \left(1 - e^{i\alpha_h^G} t^2 (E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1) \right) & 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\alpha_e^G} E_1 \\ 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & D_R t^2 \left((E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1) + e^{-i\alpha_e^G} t^2 (E_2^2 - E_1^2) \right) & \\ 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} e^{i\alpha_h^G} E_1 & 0 & \left(1 + t^2 e^{-i\alpha_e^G} (E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1) \right) \end{pmatrix} \quad (\text{C.18})$$

con E_1 y E_2 como

$$E_1 = \frac{(e^{-i\alpha_e^S} + e^{i\alpha_h^S})}{2}, \quad E_2 = \frac{(e^{-i\alpha_e^S} - e^{i\alpha_h^S})}{2},$$

y

$$D_R = \left(1 + t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1 \right) - t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1 \right) - t^4 e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G} (E_2^2 - E_1^2) \right) \quad (\text{C.19})$$

con

$$t = \frac{t}{\hbar v}.$$

Las funciones de Green del sistema sin acoplar necesarias para el calculo de la función de Green fuera del equilibrio (C.17) son, para $x > x'$

$$\hat{g}^>(x, 0^-) = \frac{-i}{2\hbar v} \begin{pmatrix} \left(\frac{E}{\Omega} H_1 + H_2 \right) & 0 & \frac{\Delta}{\Omega} H_1 & 0 \\ \left(\frac{E}{\Omega} L_2 + L_1 \right) & 0 & \frac{\Delta}{\Omega} L_2 & 0 \\ \frac{\Delta}{\Omega} H_1 & 0 & \left(\frac{E}{\Omega} H_1 - H_2 \right) & 0 \\ \frac{\Delta}{\Omega} L_2 & 0 & \left(\frac{E}{\Omega} L_2 - L_1 \right) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.20})$$

para $x < x'$

$$\hat{g}^<(0^+, x') = \frac{-i}{2\hbar v} \begin{pmatrix} \left(\frac{E}{\Omega} H'_1 + H'_2 \right) & - \left(\frac{E}{\Omega} L'_2 + L'_1 \right) & \frac{\Delta}{\Omega} H'_1 & - \frac{\Delta}{\Omega} L'_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\Delta}{\Omega} H'_1 & - \frac{\Delta}{\Omega} L'_2 & \left(\frac{E}{\Omega} H'_1 - H'_2 \right) & - \left(\frac{E}{\Omega} L'_2 - L'_1 \right) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.21})$$

con

$$H_{1(2)}^{(\prime)} = \left(e^{-i\alpha_e^S} e^{ix^{(\prime)} k_e^S} \pm e^{i\alpha_h^S} e^{-ix^{(\prime)} k_h^S} \right) \\ L_{1(2)}^{(\prime)} = \left(e^{ix^{(\prime)} k_e^S} \pm e^{-ix^{(\prime)} k_h^S} \right)$$

Los productos necesarios para el calculo de (C.17) son

$$tg^>(x, 0^-) \tau_1 = \frac{-it}{2\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & \left(\frac{E}{\Omega} H_1 + H_2\right) & 0 & -\frac{\Delta}{\Omega} H_1 \\ 0 & \left(\frac{E}{\Omega} L_2 + L_1\right) & 0 & -\frac{\Delta}{\Omega} L_2 \\ 0 & \frac{\Delta}{\Omega} H_1 & 0 & -\left(\frac{E}{\Omega} H_1 - H_2\right) \\ 0 & \frac{\Delta}{\Omega} L_2 & 0 & -\left(\frac{E}{\Omega} L_2 - L_1\right) \end{pmatrix} \quad (C.22)$$

$$tg^<(-0^+, -0^-) \tau_1^T g^<(0^+, x') = \frac{-t}{2\hbar^2 v^2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\Omega} E H'_1 + H'_2 & L'_1 + \frac{1}{\Omega} E L'_2 & -\frac{\Delta}{\Omega} H'_1 & \frac{\Delta}{\Omega} L_2 \\ e^{-i\alpha_e^G} \left(\frac{1}{\Omega} E H'_1 + H'_2\right) & -e^{-i\alpha_e^G} \left(L'_1 + \frac{1}{\Omega} E L'_2\right) & \frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\alpha_e^G} H'_1 & -\frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\alpha_e^G} L_2 \\ -\frac{\Delta}{\Omega} H'_1 & \frac{\Delta}{\Omega} L'_2 & H'_2 - \frac{1}{\Omega} E H'_1 & \frac{1}{\Omega} E L_2 - L_1 \\ -\frac{\Delta}{\Omega} e^{i\alpha_h^G} H'_1 & \frac{\Delta}{\Omega} e^{i\alpha_h^G} L'_2 & e^{i\alpha_h^G} \left(H'_2 - \frac{1}{\Omega} E H'_1\right) & -e^{i\alpha_h^G} \left(L_1 - \frac{1}{\Omega} E L_2\right) \end{pmatrix} \quad (C.23)$$

Reemplazando (C.2.1) y (C.23) en (C.17) la función de Green es

$$G_{RR}(x, x') = g(x, x') + \frac{i}{\hbar v} \frac{t^2}{4D_R} \begin{pmatrix} 0 & \left(\frac{E}{\Omega} H_1 + H_2\right) & 0 & -\frac{\Delta}{\Omega} H_1 \\ 0 & \left(\frac{E}{\Omega} L_2 + L_1\right) & 0 & -\frac{\Delta}{\Omega} L_2 \\ 0 & \frac{\Delta}{\Omega} H_1 & 0 & -\left(\frac{E}{\Omega} H_1 - H_2\right) \\ 0 & \frac{\Delta}{\Omega} L_2 & 0 & -\left(\frac{E}{\Omega} L_2 - L_1\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_R t^2 \left(\left(E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1\right) - e^{i\alpha_h^G} t^2 (E_2^2 - E_1^2) \right) & 0 & -t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \\ 0 & \left(1 - e^{i\alpha_h^G} t^2 \left(E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1\right)\right) & 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\alpha_e^G} E_1 \\ 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & D_R t^2 \left(\left(E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1\right) + e^{-i\alpha_e^G} t^2 (E_2^2 - E_1^2) \right) & \\ 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} e^{i\alpha_h^G} E_1 & 0 & \left(1 + t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1\right)\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\Omega} E H'_1 + H'_2 & L_1 + \frac{1}{\Omega} E L_2 & -\frac{\Delta}{\Omega} H'_1 & \frac{\Delta}{\Omega} L_2 \\ e^{-i\alpha_e^G} \left(\frac{1}{\Omega} E H'_1 + H'_2\right) & -e^{-i\alpha_e^G} \left(L_1 + \frac{1}{\Omega} E L_2\right) & \frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\alpha_e^G} H'_1 & -\frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\alpha_e^G} L_2 \\ -\frac{\Delta}{\Omega} H'_1 & \frac{\Delta}{\Omega} L_2 & H'_2 - \frac{1}{\Omega} E H'_1 & \frac{1}{\Omega} E L_2 - L_1 \\ -\frac{\Delta}{\Omega} e^{i\alpha_h^G} H'_1 & \frac{\Delta}{\Omega} e^{i\alpha_h^G} L_2 & -e^{i\alpha_h^G} \left(H'_2 + \frac{1}{\Omega} E H'_1\right) & -e^{i\alpha_h^G} \left(L_1 - \frac{1}{\Omega} E L_2\right) \end{pmatrix} \quad (C.24)$$

Definida para $x > x'$ y $x < x'$, es necesario escoger $g_1(x, x')$ o $g_2(x, x')$ respectivamente. La función de Green en la superficie es

para $x > x'$

$$G_{RR}^{>}(0^+, 0^-) = -\frac{i}{\hbar v D_R} \begin{pmatrix} \left(\left(E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) - t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2^2 - E_1^2) \right) & -t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2^2 - E_1^2) - \left(E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) \right) & \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & -t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{i\alpha_h^G} \\ \left(1 - t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1 \right) \right) & -t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) - 1 \right) & -t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} & t^4 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G} \\ \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} & - \left(\left(E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) + t^2 e^{-i\alpha_e^G} (E_2^2 - E_1^2) \right) & t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(e^{-i\alpha_e^G} (E_2^2 - E_1^2) t^2 + \left(E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) \right) \\ t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{i\alpha_h^G} & t^4 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G} & - \left(1 + t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1 \right) \right) & t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(e^{-i\alpha_e^G} \left(E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) t^2 + 1 \right) \end{pmatrix} \quad (C.25)$$

Para $x < x'$,

$$G_{RR}^{<}(0^+, 0^-) = -\frac{i}{\hbar v} \frac{1}{D_R} \begin{pmatrix} \left(\left(E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) - t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2^2 - E_1^2) \right) & \left(1 - t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1 \right) \right) & \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & -e^{i\alpha_h^G} t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \\ t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2^2 - E_1^2) - \left(E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) \right) & -t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) - 1 \right) & -t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} & t^4 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G} \\ \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & e^{-i\alpha_e^G} t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & - \left(\left(E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) + t^2 e^{-i\alpha_e^G} (E_2^2 - E_1^2) \right) & \left(1 + t^2 e^{-i\alpha_e^G} \left(E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1 \right) \right) \\ t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{i\alpha_h^G} & t^4 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G} & -t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(t^2 e^{-i\alpha_e^G} (E_2^2 - E_1^2) + \left(E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) \right) & t^2 e^{i\alpha_h^G} \left(e^{-i\alpha_e^G} \left(E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) t^2 + 1 \right) \end{pmatrix} \quad (C.26)$$

117

C.2.1. Función de Green que relaciona las regiones derecha e izquierda G_{RL}

La ecuación de Dyson caso es

$$G(x, x') = g(x, 0^-) \Sigma_{RL} G(-0^+, x') \quad (C.27)$$

En este caso la función $G(-0^+, x')$ es

$$G(-0^+, x') = g(-0^+, x') + g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} G(0^+, x') \quad (C.28)$$

la cual depende de $G(0^+, x')$ que es

$$G(0^+, x') = g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} G(-0^+, x') \quad (C.29)$$

reemplazando esté en (C.7) se encuentra

$$G(-0^+, x') = (I - g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL})^{-1} g(-0^+, x') \quad (C.30)$$

reemplazando este resultado en (C.6) la ecuación de Dyson es

$$G(x, x') = g(x, 0^-) \Sigma_{RL} (I - g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL})^{-1} g(-0^+, x') \quad (C.31)$$

La ecuación de Dyson en este caso es

$$G_{RL}(x, x') = g(x, 0^-) t \tau^T M_R^{zz} g(-0^+, x') \quad (\text{C.32})$$

Reemplazando en la expresión (C.32) los resultados encontrados en y (C.18) la función de Green en este caso es

$$G_{RL}(x, x') = \frac{-it}{2\hbar v} e^{-ikx'} \frac{-i}{\hbar v D_R} \begin{pmatrix} 0 & \frac{E}{\Omega} H_1 + H_2 & 0 & -\frac{\Delta}{\Omega} H_1 \\ 0 & \frac{E}{\Omega} L_2 + L_1 & 0 & -\frac{\Delta}{\Omega} L_2 \\ 0 & \frac{\Delta}{\Omega} H_2 & 0 & -\frac{E}{\Omega} H_1 + H_2 \\ 0 & \frac{\Delta}{\Omega} L_2 & 0 & -\frac{E}{\Omega} L_2 + L_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_R t^2 \left((E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1) - e^{i\alpha_h^G} t^2 (E_2^2 - E_1^2) \right) & 0 & -t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \\ 0 & \left(1 - e^{i\alpha_h^G} t^2 (E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1) \right) & 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} e^{-i\alpha_e^G} E_1 \\ 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & D_R t^2 \left((E_2 - \frac{E}{\Omega} E_1) + e^{-i\alpha_e^G} t^2 (E_2^2 - E_1^2) \right) & \\ 0 & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} e^{i\alpha_h^G} E_1 & 0 & \left(1 + t^2 e^{-i\alpha_e^G} (E_2 + \frac{E}{\Omega} E_1) \right) \end{pmatrix} \quad (\text{C.33})$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & e^{-i\alpha_e^G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & e^{i\alpha_h^G} \end{pmatrix} \quad (\text{C.34})$$

En la superficie

$$G_{RL}(0^+, -0^-) = -\frac{t}{\hbar v D_R} \begin{pmatrix} -\left(t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2^2 - E_1^2) - (E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1) \right) & -e^{-i\alpha_e^G} \left(t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2^2 - E_1^2) - (E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1) \right) & \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & -e^{i\alpha_h^G} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \\ 1 - t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1) & -e^{-i\alpha_e^G} \left(t^2 e^{i\alpha_h^G} (E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1) - 1 \right) & -t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G} \\ \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & e^{-i\alpha_e^G} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & -\left(t^2 e^{-i\alpha_e^G} (E_2^2 - E_1^2) + (E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1) \right) & e^{i\alpha_h^G} \left(t^2 e^{-i\alpha_e^G} (E_2^2 - E_1^2) + (E_2 - \frac{1}{\Omega} E E_1) \right) \\ t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{i\alpha_h^G} & t^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G} & -e^{-i\alpha_e^G} (E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1) t^2 - 1 & e^{i\alpha_h^G} \left(e^{-i\alpha_e^G} (E_2 + \frac{1}{\Omega} E E_1) t^2 + 1 \right) \end{pmatrix} \quad (\text{C.35})$$

Cuando $\Delta = 0$

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{(e^{-i\alpha_e^G} + e^{i\alpha_h^G})}{2}, \quad E_2 = \frac{(e^{-i\alpha_e^G} - e^{i\alpha_h^G})}{2}, \\
E_2 - E_1 &= -e^{i\alpha_h^G} \\
E_1 + E_2 &= e^{-i\alpha_e^G} \\
E_1^2 - E_2^2 &= e^{-i\alpha_e^G} e^{i\alpha_h^G}
\end{aligned}$$

$$G_{RL}(0^+, -0^-) = -\frac{t}{\hbar v} \begin{pmatrix} \frac{e^{-i\alpha_e^G}}{(1+t^2 e^{-2i\alpha_e^G})} & \frac{e^{-2i\alpha_e^G}}{(1+t^2 e^{-2i\alpha_e^G})} & 0 & 0 \\ \frac{1}{(1+t^2 e^{-2i\alpha_e^G})} & \frac{e^{-i\alpha_e^G}}{(1+t^2 e^{-2i\alpha_e^G})} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{e^{i\alpha_h^G}}{(1+t^2 e^{2i\alpha_h^G})} & -\frac{e^{2i\alpha_h^G}}{(1+t^2 e^{2i\alpha_h^G})} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{(1+t^2 e^{2i\alpha_h^G})} & \frac{e^{i\alpha_h^G}}{(1+t^2 e^{2i\alpha_h^G})} \end{pmatrix} \quad (\text{C.36})$$

Función de Green para la juntura grafeno - película de grafeno -
superconductor

D.1. Frontera “zigzag”

Para encontrar la función de Green fuera del equilibrio para la juntura $GG'S$, se calcula inicialmente la función de Green para el acople entre un grafeno semi - infinito y una película de grafeno $G'G$ acopladas en $x = -W$, a la cual posteriormente se le acoplará un superconductor semi - infinito al lado derecho en $x = 0$.

En este caso se calcula la función de Green del sistema acoplado $G'S$ al lado izquierdo G_{RR} que pasará a ser luego la función en equilibrio g_{LL} del acople final.

función de Green fuera del equilibrio G_{RR}

En este caso la juntura se acopla en $x = -W$ de tal manera que la ecuación de Dyson puede ser escrita como

$$G(x, x') = g(x, x') + g(x, -W + 0^-) \Sigma_{RL} G(-W - 0^+, x') \quad (D.1)$$

Para encontrar $G(x, x')$ es necesario escribir la función de Green $G(-W - 0^+, x')$ de la forma

$$G(-W - 0^+, x') = g(-W - 0^+, -W - 0^-) \Sigma_{LR} G(-W + 0^+, x') \quad (D.2)$$

está a su vez depende de $G(-W + 0^+, x')$ que puede ser escrita como

$$G(-W + 0^+, x') = g(-W + 0^+, x') + g(-W - 0^+, -W + 0^-) \Sigma_{RL} G(-W - 0^+, x') \quad (D.3)$$

reemplazando $G(-W + 0^+, x')$ en $G(-W - 0^+, x')$ se encuentra

$$G(-W - 0^+, x') = \left(I - g(-W - 0^+, -W - 0^-) \Sigma_{LR} g(-W + 0^+, -W + 0^-) \Sigma_{RL} \right)^{-1} \\ g(-W - 0^+, -W - 0^-) \Sigma_{LR} g(-W + 0^+, x') \quad (D.4)$$

reemplazando este resultado en $G(x, x')$ la ecuación de Dyson puede escribirse como

$$G_{RR}(x, x') = g(x, x') + g(x, -W + 0^-) \\ \Sigma_{RL} \left[I - g(-W - 0^+, -W - 0^-) \tilde{\Sigma}_{LR} g(-W + 0^+, -W + 0^-) \Sigma_{RL} \right]^{-1} \\ g(-W - 0^+, -W - 0^-) \Sigma_{LR} g(-W + 0^+, x')$$

con

$$\begin{aligned}
g(x, -W + 0^-) &= g_p^>(x, -W), \text{ para } x > x', \\
g(-W + 0^+, x') &= g_p^<(-W, x'), \text{ para } x < x', \\
g(-W + 0^+, -W + 0^-) &= g_p^>(-W) \text{ para } x > x' \\
\text{y } g(-W - 0^+, -W - 0^-) &= g_g^<(-W) \text{ para } x < x'
\end{aligned}$$

en este caso la autoenergía es $\Sigma_{RL} = t\tau_1$ y $\Sigma_{LR} = t\tau_1^T$, con

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_1 \end{pmatrix} \quad (\text{D.5})$$

y $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. La función de Green es entonces

$$\begin{aligned}
G_{RR}^{><}(x, x') &= g^{><}(x, x') + t^2 g_p^>(x, -W) \tau_1 \left[I - t^2 g_g^<(-W) \tau_1^T g_p^>(-W) \tau_1 \right]^{-1} \\
&\quad g_g^<(-W) \tau_1^T g_p^<(-W, x') \quad (\text{D.6})
\end{aligned}$$

con

$$M^{zz} = [I - t^2 g_g^<(-W) \tau_1^T g_p^>(-W) \tau_1]^{-1}$$

En este caso se necesita la función de Green $g_g^<(-W)$ la cual corresponde a la función de Green de un grafeno semi-infinito con fronteras $x_L = -\infty$ y $x_R = -W$, y $g_p^>(-W)$ la cual corresponde a una película de grafeno con fronteras $x_L = -W$ y $x_R = 0$ las dos evaluadas en el acople, estas funciones son

$$g_g^<(-W) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$$

y

$$g_p^>(-W) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

con

$$c = \frac{e^{-i\alpha} (1 - e^{2ikW})}{(1 + e^{-2i\alpha} e^{2ikW})}$$

Con lo que la matriz M^{zz} es

$$M^{zz} = \begin{pmatrix} 1 & -t^2 c_e & 0 & 0 \\ 0 & c_e e^{-i\alpha_e} t^2 + 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & t^2 c_h \\ 0 & 0 & 0 & c_h e^{i\alpha_h} t^2 + 1 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \hat{M}_e^{zz} & 0 \\ 0 & \hat{M}_h^{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{D.7})$$

por lo que la matriz $\hat{M}_{e(h)}^{zz}$ en un espacio 2×2 es

$$\hat{M}^{zz} = \frac{1}{D_{1,e(h)}} \begin{pmatrix} D_{1,e(h)} & t^2 c_{e(h)} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

donde $t = \frac{t}{\hbar v}$, y

$$D_{1,e(h)} = c_{e(h)} e^{\mp i \alpha_{e(h)} t^2} + 1$$

reemplazando estos resultados en la ecuación de Dyson

$$\hat{G}_{RR}^{><}(x, x') = \hat{g}^{><}(x, x') + t_p^2 \hat{g}_p^{>}(x, -W) \tau_1 M^{zz} \hat{g}_g^{<}(-W) \tau_1^T \hat{g}_p^{<}(-W, x') \quad (\text{D.8})$$

con las funciones de Green para la película dadas por

$$\hat{g}_p^{<}(x, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c_{x'} f_x & -d_{x'} f_x \\ -c_{x'} h_x & d_{x'} h_x \end{pmatrix} \text{ y } \hat{g}_p^{>}(x, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c_x f_{x'} & c_x h_{x'} \\ d_x f_{x'} & d_x h_{x'} \end{pmatrix} \quad (\text{D.9})$$

con

$$c_{x^{(r)}} = \frac{e^{ikx^{(r)}} e^{-i\alpha} (1 - e^{-2ikx^{(r)}})}{(1 + e^{-2i\alpha} e^{2ikW})}, \quad d_{x^{(r)}} = \frac{e^{ikx^{(r)}} (1 + e^{-2i\alpha} e^{-2ikx^{(r)}})}{(1 + e^{-2i\alpha} e^{2ikW})}$$

$$f_{x^{(r)}} = \frac{e^{-ikx^{(r)}} e^{i\alpha} (1 + e^{-2i\alpha} e^{2ikW} e^{2ikx^{(r)}})}{(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})}, \quad h_{x^{(r)}} = \frac{e^{-ikx^{(r)}} (1 - e^{2ikW} e^{2ikx^{(r)}})}{(e^{i\alpha} + e^{-i\alpha})}.$$

Al evaluar las expresiones (D.9) en los puntos de acople se encuentra

$$\hat{g}_p^{<}(-W, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c_{x'} e^{ikW} & -d_{x'} e^{ikW} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{g}_p^{>}(x, -W) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c_x e^{ikW} & 0 \\ d_x e^{ikW} & 0 \end{pmatrix}$$

La función de Green (D.8) es entonces

$$\hat{G}_{RR}^{><}(x, x') = \hat{g}_p^{><}(x, x') - \frac{-i}{\hbar v} \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} \begin{pmatrix} c_x c_{x'} & -c_x d_{x'} \\ d_x c_{x'} & -d_x d_{x'} \end{pmatrix} \quad (\text{D.10})$$

Evalutando esta teniendo en cuenta el el signo de las funciones de Green

$$\hat{G}_{RR}^{>}(x, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c_x \left(f_{x'} - \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} c_{x'} \right) & c_x \left(h_{x'} + \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} d_{x'} \right) \\ d_x \left(f_{x'} - \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} c_{x'} \right) & d_x \left(h_{x'} + \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} d_{x'} \right) \end{pmatrix} \quad (\text{D.11})$$

$$\hat{G}_{RR}^{<}(x, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c_{x'} \left(f_x - \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} c_x \right) & -d_{x'} \left(f_x - \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} c_x \right) \\ -c_{x'} \left(h_x + \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} d_x \right) & d_{x'} \left(h_x + \frac{t^2}{D_1} e^{-i\alpha} e^{2(ikW)} d_x \right) \end{pmatrix} \quad (\text{D.12})$$

Ahora si se acopla el superconductor del lado derecho en $x = 0$, es necesario calcular la función de Green G_{LL} del sistema acoplado.

Para la función de Green fuera del equilibrio G_{LL}

La ecuación de Dyson puede escribirse como

$$G(x, x') = g(x, x') + g(x, -0^-) \Sigma_{LR} G(0^+, x') \quad (\text{D.13})$$

Para encontrar $G(x, x')$ es necesario escribir la función de Green $G(0^+, x')$ de la forma

$$G(0^+, x') = g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} G(-0^+, x') \quad (\text{D.14})$$

está a su vez depende de $G(-0^+, x')$ que puede ser escrita como

$$G(-0^+, x') = g(-0^+, x') + g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} G(0^+, x') \quad (\text{D.15})$$

reemplazando $G(-0^+, x')$ en $G(0^+, x')$ se encuentra

$$G(0^+, x') = (I - g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR})^{-1} g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} g(-0^+, x') \quad (\text{D.16})$$

reemplazando este resultado en $G(x, x')$ la ecuación de Dyson puede escribirse como

$$G(x, x') = g(x, x') + g(x, -0^-) \Sigma_{LR} \left(I - g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} g(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR} \right)^{-1} g(0^+, 0^-) \Sigma_{RL} g(-0^+, x')$$

con

$g^<(x, -0^-)$, para $x < x'$, $g^>(-0^+, x')$, para $x > x'$, $g^>(0^+, 0^-)$ para $x > x'$ y $g^<(-0^+, -0^-)$ para $x < x'$ con estas consideraciones la función de green en este caso es

$$G(x, x') = g(x, x') + t^2 g^<(x, -0^-) \tau_1^T M_p^{zz} g^>(0^+, 0^-) \tau_1 g^>(-0^+, x') \quad (\text{D.17})$$

definiendo

$$M_p^{zz} = (I - t^2 g^>(0^+, 0^-) \tau_1 g^<(-0^+, -0^-) \tau_1^T)^{-1} \quad (\text{D.18})$$

En este caso la función de Green de la izquierda es descrita por el acople entre el grafeno y la película, está corresponde a la función de Green de un superconductor semi-infinito con fronteras en $x_L = 0$ y $x_R = -W$, las funciones de Green en este caso son

$$g^>(0^+, 0^-) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} e_1 & 0 & \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\Delta}{\Omega} E_1 & 0 & -e_2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.19})$$

con

$$e_{1(2)} = \left(E_2 \pm \frac{1}{\Omega} E E_1 \right) \quad (\text{D.20})$$

y

$$g^<(-0^+, -0^-) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & b \end{pmatrix} \quad (\text{D.21})$$

con

$$\begin{aligned} a &= \left(c_e + \frac{t^2}{D_e} d_e^2 e^{-i\alpha_e} \right), \quad b = \left(c_h + \frac{t^2}{D_h} e^{i\alpha_h} d_h^2 \right), \\ d_{e(h)} &= \frac{e^{\pm iWk_e} (1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}})}{(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W})}, \quad c_{e(h)} = \frac{e^{\mp i\alpha_{e(h)}} (1 - e^{\pm 2ik_{e(h)}W})}{(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W})}, \\ D_{e(h)} &= c_{e(h)} e^{\mp i\alpha_{e(h)}} t^2 + 1 \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

La matriz M_p^{zz} es entonces

$$M_p^{zz} = \begin{pmatrix} 1 + t_1^2 a e_1 & 0 & t_1^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 b & 0 \\ t_1^2 a & 1 & 0 & 0 \\ t_1^2 \frac{\Delta}{\Omega} E_1 a & 0 & 1 - t_1^2 b e_2 & 0 \\ 0 & 0 & -t_1^2 b & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{D} \begin{pmatrix} F & 0 & -b \frac{\Delta}{\Omega} E_1 t_1^2 & 0 \\ -a F t_1^2 & D & ab \frac{\Delta}{\Omega} E_1 t_1^4 & 0 \\ -a \frac{\Delta}{\Omega} E_1 t_1^2 & 0 & C & 0 \\ -ab \frac{\Delta}{\Omega} E_1 t_1^4 & 0 & b C t_1^2 & D \end{pmatrix} \quad (\text{D.23})$$

con

$$D = 1 - t_1^2 (b e_2 - a e_1) - t_1^4 ab (E_2^2 - E_1^2) \quad (\text{D.24})$$

Las funciones de Green necesarias para el calculo de las funciones de Green fuera del equilibrio son

$$g^<(x, -0^-) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & -d_{0e} F_{xe} & 0 & 0 \\ 0 & d_{0e} H_{xe} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{0h} F_{xh} \\ 0 & 0 & 0 & d_{0h} H_{xh} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.25})$$

$$g^>(-0^+, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_{0e} F_{x'e} & d_{0e} H_{x'e} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -d_{0h} F_{x'h} & d_{0h} H_{x'h} \end{pmatrix} \quad (\text{D.26})$$

con

$$F_{x^{(\prime)}e(h)} = \left(f_{x^{(\prime)}e(h)} - \frac{t^2}{D_{e(h)}} e^{\mp i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W} c_{x^{(\prime)}e(h)} \right) \quad (\text{D.27})$$

$$H_{x^{(\prime)}e(h)} = \left(h_{x^{(\prime)}e(h)} + \frac{t^2}{D_{e(h)}} e^{\mp i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W} d_{x^{(\prime)}e(h)} \right) \quad (\text{D.28})$$

donde

$$\begin{aligned}
c_{x^{(\prime)}e(h)} &= \frac{e^{\pm ik_{e(h)}x^{(\prime)}} e^{\mp i\alpha_{e(h)}} \left(1 - e^{\mp 2ik_{e(h)}x^{(\prime)}}\right)}{\left(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W}\right)}, \\
d_{x^{(\prime)}e(h)} &= \frac{e^{\pm ik_{e(h)}x^{(\prime)}} \left(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\mp 2ik_{e(h)}x^{(\prime)}}\right)}{\left(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W}\right)}, \\
f_{x^{(\prime)}e(h)} &= \frac{e^{\mp ik_{e(h)}x^{(\prime)}} e^{\pm i\alpha_{e(h)}} \left(1 + e^{\mp 2i\alpha_{e(h)}} e^{\pm 2ik_{e(h)}W} e^{\pm 2ik_{e(h)}x^{(\prime)}}\right)}{\left(e^{i\alpha_{e(h)}} + e^{-i\alpha_{e(h)}}\right)}, \\
h_{x^{(\prime)}e(h)} &= \frac{e^{\mp ik_{e(h)}x^{(\prime)}} \left(1 - e^{\pm 2ik_{e(h)}W} e^{\pm 2ik_{e(h)}x^{(\prime)}}\right)}{\left(e^{i\alpha_{e(h)}} + e^{-i\alpha_{e(h)}}\right)},
\end{aligned} \tag{D.29}$$

Reemplazando estas funciones y haciendo los productos la función de Green (D.17) es

$$G^>(x, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} (c_{xe} - t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 F_{ex}) F_{x'e} & (c_{xe} - t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 F_{xe}) H_{x'e} & t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{ex} F_{hx'} & -t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{xe} H_{x'h} \\ (d_{xe} + t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 H_{ex}) F_{x'e} & (d_{xe} + t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 H_{xe}) H_{x'e} & -t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} H_{ex} F_{hx'} & t_1^2 \frac{1}{D} d_{0e} d_{0h} H_{xe} H_{x'h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \\ t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{hx} F_{ex'} & t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{hx} H_{ex'} & (c_{xh} - t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 F_{xh}) F_{x'h} & -(c_{xh} - t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 F_{xh}) H_{x'h} \\ t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} H_{hx} F_{ex'} & t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} H_{hx} H_{ex'} & -(d_{xh} + t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 H_{xh}) F_{x'h} & (d_{xh} + t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 H_{xh}) H_{x'h} \end{pmatrix} \tag{D.30}$$

$$G^<(x, x') = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} (c_{x'e} - t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 F_{ex'}) F_{ex} & -(d_{x'e} + t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 H_{x'e}) F_{xe} & t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{xe} F_{x'h} & -t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{xe} H_{x'h} \\ -(c_{x'e} - t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 F_{ex'}) H_{xe} & (d_{x'e} + t_1^2 \frac{1}{D} B d_{0e}^2 H_{x'e}) H_{xe} & -t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} H_{xe} F_{x'h} & t_1^2 \frac{1}{D} d_{0e} d_{0h} H_{xe} H_{x'h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \\ t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{hx} F_{ex'} & t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} F_{hx} H_{x'e} & (c_{x'h} - t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 F_{x'h}) F_{xh} & (d_{x'h} + t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 H_{x'h}) F_{xh} \\ t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} H_{hx} F_{ex'} & t_1^2 \frac{1}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_{0e} d_{0h} H_{hx} H_{x'e} & (c_{x'h} - t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 F_{x'h}) H_{xh} & (d_{x'h} + t_1^2 \frac{1}{D} A d_{0h}^2 H_{x'h}) H_{xh} \end{pmatrix} \tag{D.31}$$

con

$$B = (bt_1^2 (E_2^2 - E_1^2) - e_1) \text{ y } A = (at_1^2 (E_2^2 - E_1^2) + e_2)$$

Para que encontrar la corriente en este tipo de junturas es necesario calcular las funciones de Green en la interfase en $x = -W$, $G^>(-W, -W) = G_{aa}$ y evaluada en cada una de las fronteras $G^<(-W, 0) = G_{aa'}$, estas funciones son

$$G^>(-W, -W) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} \left(c_e - B \frac{t_1^2}{DD_e} d_e^2\right) \frac{1}{D_e} & \frac{t^2}{D_e} e^{-i\alpha_e} \left(c_e - B \frac{t_1^2}{DD_e} d_e^2\right) & \frac{t_1^2}{DD_e D_h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e d_h & -\frac{t_1^2}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^2}{D_e D_h} d_e d_h e^{i\alpha_h} \\ \left(1 + B \frac{t_1^2}{D} \frac{t^2}{D_e} d_e^2 e^{-i\alpha_e}\right) \frac{1}{D_e} & \frac{t^2}{D_e} e^{-i\alpha_e} \left(1 + B \frac{t_1^2}{D} \frac{t^2}{D_e} d_e^2 e^{-i\alpha_e}\right) & -\frac{t_1^2}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^2}{D_e D_h} d_e d_h e^{-i\alpha_e} & \frac{t_1^2}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^4}{D_e D_h} d_e d_h e^{-i\alpha_e} e^{i\alpha_h} \\ \frac{t_1^2}{DD_e D_h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e d_h & \frac{t_1^2}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^2}{D_e D_h} d_e d_h e^{-i\alpha_e} & \frac{1}{D_h} \left(c_h - A \frac{t_1^2}{DD_h} d_h^2\right) & -\frac{t^2}{D_h} e^{i\alpha_h} \left(c_h - A \frac{t_1^2}{DD_h} d_h^2\right) \\ \frac{t_1^2}{D} \frac{\Delta}{\Omega} \frac{t^2}{D_e D_h} E_1 d_e d_h e^{i\alpha_h} & \frac{t_1^2}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^4}{D_e D_h} d_e d_h e^{-i\alpha_e} e^{i\alpha_h} & -\frac{1}{D_h} \left(1 + A \frac{t_1^2}{D} \frac{t^2}{D_h} d_h^2 e^{i\alpha_h}\right) & \frac{t^2}{D_h} e^{i\alpha_h} \left(1 + A \frac{t_1^2}{D} \frac{t^2}{D_h} d_h^2 e^{i\alpha_h}\right) \end{pmatrix} \quad (\text{D.32})$$

$$G^<(-W, 0) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} -\frac{t_1^2}{DD_e} B d_e & -d_e \frac{1}{D_e D} (1 - t_1^2 b e_2) & +\frac{t_1^2}{DD_e} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e & -\frac{t_1^2}{DD_e} b \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e \\ \frac{t_1^2}{D} B \frac{t^2}{D_e} d_e e^{-i\alpha_e} & d_e \frac{t^2}{D_e D} e^{-i\alpha_e} (1 - t_1^2 b e_2) & -\frac{t_1^2}{D} \frac{t^2}{D_e} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e e^{-i\alpha_e} & \frac{t_1^2}{D} b \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^2}{D_e} d_e e^{-i\alpha_e} \\ \frac{t_1^2}{DD_h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_h & \frac{t_1^2}{DD_h} a \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_h & -\frac{t_1^2}{DD_h} A d_h & d_h \frac{1}{D_h D} (1 + t_1^2 e_1 a) \\ \frac{t_1^2}{D} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^2}{D_h} d_h e^{i\alpha_h} & \frac{t_1^2}{D} a \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \frac{t^2}{D_h} d_h e^{i\alpha_h} & -\frac{t_1^2}{D} \frac{t^2}{D_h} A d_h e^{i\alpha_h} & d_h \frac{t^2}{D_h D} e^{i\alpha_h} (1 + t_1^2 e_1 a) \end{pmatrix} \quad (\text{D.33})$$

$$D = 1 - t_1^2 (b e_2 - a e_1) - t_1^4 a b (E_2^2 - E_1^2)$$

En el límite túnel

$$G^>(-W, -W) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} c_e & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_h & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.34})$$

$$G^<(-W, 0) = \frac{-i}{\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & -d_e e^{ik_e W} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_h e^{-ik_h W} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{D.35})$$

Corriente eléctrica de las juntas con base en grafeno

E.1. Junta grafeno - superconductor

E.1.1. Frontera “armchair”

La corriente en este tipo de sistemas considerando frontera “armchair” se escribe como

$$I(\tau) = \frac{e}{h} \text{Tr} \left(\tau_z \left(t G_{R,L}^{+,-}(\tau, \tau) - t^* G_{L,R}^{+,-}(\tau, \tau) \right) \right) \quad (\text{E.1})$$

con

$$t = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 \\ t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t^* \\ 0 & 0 & -t^* & 0 \end{pmatrix} \text{ y } \tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{E.2})$$

donde las funciones de Green son de dimensión 4×4 . Las funciones de Green cumplen la ecuación de Dyson

$$G(E) = g(E) + g(E) \Sigma G(E), \quad (\text{E.3})$$

la cual puede ser escrita como

$$\begin{aligned} G^{+-}(E) &= g^{+-}(E) + (g(E) \Sigma G(E))^{+-} \\ &= g^{+-}(E) + g^{+-}(E) \Sigma^a G^a(E) + g^r(E) \Sigma^r G^{+-}(E). \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

Considerando que $g_{RL(LR)}^{+-}(E) = 0$ y $\Sigma_{RR(LL)} = 0$ las funciones de Green para el problema pueden ser escritas como

$$G_{RL}^{+-}(E) = g_{RR}^{+-}(E) \Sigma_{RL}^a G_{LL}^a(E) + g_{RR}^r(E) \Sigma_{RL}^r G_{LL}^{+-}(E) \quad (\text{E.5})$$

$$G_{LR}^{+-}(E) = g_{LL}^{+-}(E) \Sigma_{LR}^a G_{RR}^a(E) + g_{LL}^r(E) \Sigma_{LR}^r G_{RR}^{+-}(E) \quad (\text{E.6})$$

La ecuación de Dyson puede ser escrita también como

$$\begin{aligned}
G^{+-}(E) &= g(E) + (G(E)\Sigma g(E))^{+-} \\
&= g^{+-}(E) + G^{+-}(E)\Sigma^a g^a(E) + G^r(E)\Sigma^r G^{+-}(E)
\end{aligned}$$

tomando las anteriores consideraciones

$$G_{RL}^{+-}(E) = G_{RR}^{+-}(E)\Sigma_{RL}^a g_{LL}^a(E) + G_{RR}^r(E)\Sigma_{RL}^r g_{LL}^{+-}(E) \quad (\text{E.7})$$

$$G_{LR}^{+-}(E) = G_{LL}^{+-}(E)\Sigma_{LR}^a g_{RR}^a(E) + G_{LL}^r(E)\Sigma_{LR}^r g_{RR}^{+-}(E) \quad (\text{E.8})$$

Reemplazando E.6 y E.7 en la expresión para la corriente

$$\begin{aligned}
I(E) &= \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Tr} \tau_z [t (G_{RR}^{+-}(E)\Sigma_{RL}^a g_{LL}^a(E) + G_{RR}^r(E)\Sigma_{RL}^r g_{LL}^{+-}(E)) \\
&\quad - t^* (g_{LL}^{+-}(E)\Sigma_{LR}^a G_{RR}^a(E) - g_{LL}^r(E)\Sigma_{LR}^r G_{RR}^{+-}(E))]
\end{aligned}$$

considerando que $\Sigma_{RL}^a = \Sigma_{LR}^a = t = t^*$, la corriente es

$$I(E) = \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} (\tau_z t (g_{LL}^{+-}(E)t G_{RR}^{+-}(E) - g_{LL}^{-+}(E)t G_{RR}^{+-}(E))). \quad (\text{E.9})$$

Considerando el sistema como uno de dos dimensiones

$$t = \begin{pmatrix} \hat{t} & 0 \\ 0 & -\hat{t} \end{pmatrix}, \quad \hat{t} = t\sigma_x \quad (\text{E.10})$$

$$g_{LL}^{(+ -)(- +)}(E) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)(- +)} & 0 \\ 0 & \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)(- +)} \end{pmatrix} \quad (\text{E.11})$$

$$g_{RR}^{(+ -)(- +)}(E) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)} & \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)(- +)} \\ \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)(- +)} & \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)} \end{pmatrix} \quad (\text{E.12})$$

$$G_{RL}^r(E) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RL,ee}^r(E) & \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \\ \hat{G}_{RL,he}^r(E) & \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \end{pmatrix}, G_{LR}^a(E) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{LR,ee}^a(E) & \hat{G}_{LR,eh}^a(E) \\ \hat{G}_{LR,he}^a(E) & \hat{G}_{LR,hh}^a(E) \end{pmatrix} \quad (\text{E.13})$$

$$G_{RR}^r(E) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RR,ee}^r(E) & \hat{G}_{RR,eh}^r(E) \\ \hat{G}_{RR,he}^r(E) & \hat{G}_{RR,hh}^r(E) \end{pmatrix}, G_{RR}^a(E) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RR,ee}^a(E) & \hat{G}_{RR,eh}^a(E) \\ \hat{G}_{RR,he}^a(E) & \hat{G}_{RR,hh}^a(E) \end{pmatrix} \quad (\text{E.14})$$

$$\tau_z = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \quad (\text{E.15})$$

La corriente puede escribirse como

$$I(E) = \frac{e}{\hbar} \int dE \left(\text{Tr} \left[\hat{t} \left(\hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)} \hat{t} \hat{G}_{RR,ee}^{-+}(E) - \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)} \hat{t} \hat{G}_{RR,ee}^{+-}(E) \right) \right] \right. \\ \left. - \text{Tr} \left[\hat{t} \left(\hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} \hat{t} \hat{G}_{RR,hh}^{-+}(E) - \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} \hat{t} \hat{G}_{RR,hh}^{+-}(E) \right) \right] \right)$$

La ecuación que relaciona las funciones de Green de no equilibrio con las funciones retardada y avanzada es

$$G^{(+ -)(- +)}(E) = [I + G^r(E) \Sigma^r(E)] g^{(+ -)(- +)}(E) [I + \Sigma^a(E) G^a(E)] \quad (\text{E.16})$$

Con ello, el cálculo explícito de la corriente es

$$G_{RR}^{(+ -)(- +)}(E) = [I + G_{RL}^r(E) \Sigma_{LR}^r(E)] g_{RR}^{(+ -)(- +)}(E) [I + \Sigma_{RL}^a(E) G_{LR}^a(E)] \quad (\text{E.17}) \\ + G_{RR}^r(E) \Sigma_{RL}^r(E) g_{LL}^{(+ -)(- +)}(E) \Sigma_{LR}^a(E) G_{RR}^a(E)$$

escribiendo el sistema en función de matrices 2×2 de la forma

$$\hat{G}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(E) = \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)} \quad (\text{E.18}) \\ + \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)} \hat{t} \hat{G}_{LR,ee}^a(E) \\ - \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)(- +)} \left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{LR,ee}^a(E) \right) \\ - \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)(- +)} \hat{t} \hat{G}_{LR,he}^a(E) \\ + \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)} \hat{t} \hat{G}_{LR,he}^a(E) \\ + \hat{G}_{RR,ee}^r(E) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)(- +)} \hat{t} \hat{G}_{RR,ee}^a(E) \\ + \hat{G}_{RR,eh}^r(E) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)(- +)} \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^a(E)$$

$$\hat{G}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(E) = \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)} - \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \hat{p} \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)} \quad (\text{E.19}) \\ + \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \hat{p} \right) \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)(- +)} \hat{p} \hat{G}_{LR,eh}^a(E) \\ + \hat{G}_{RL,he}^r(E) \hat{p} \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)(- +)} \left(\hat{I} - \hat{p} \hat{G}_{LR,hh}^a(E) \right) \\ - \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \hat{p} \right) \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)} \hat{p} \hat{G}_{LR,hh}^a(E) \\ + \hat{G}_{RL,he}^r(E) \hat{p} \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)} \hat{p} \hat{G}_{LR,eh}^a(E) \\ + \hat{G}_{RR,he}^r(E) \hat{p} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)(- +)} \hat{p} \hat{G}_{RR,eh}^a(E) \\ + \hat{G}_{RR,hh}^r(E) \hat{p} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)(- +)} \hat{p} \hat{G}_{RR,hh}^a(E)$$

Utilizando las siguiente relaciones para las funciones de Green en equilibrio para cada contacto

$$\begin{aligned} g_{LL}^{(+ -)}(E) &= 2\pi i \rho_{LL}(E) f_{LL}(E), \quad g_{LL}^{(- +)}(E) = -2\pi i \rho_{LL}(E) (I - f_{LL}(E)) \\ g_{RR}^{(+ -)}(E) &= 2\pi i \rho_{RR}(E) f(E), \quad g_{RR}^{(- +)}(E) = -2\pi i \rho_{RR}(E) (I - \tilde{f}(E)) \end{aligned} \quad (\text{E.20})$$

con

$$\begin{aligned} \rho_{LL}(E) &= \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) & 0 \\ 0 & \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \end{pmatrix}, \quad f_{LL}(E) = \begin{pmatrix} \hat{f}_{LL,ee}(E) & 0 \\ 0 & \hat{f}_{LL,hh}(E) \end{pmatrix}, \\ \rho_{RR}(E) &= \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{RR,ee}(E) & \hat{\rho}_{RR,eh}(E) \\ \hat{\rho}_{RR,he}(E) & \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \end{pmatrix}, \quad f_{RR}(E) = \begin{pmatrix} \hat{f}(E) & 0 \\ 0 & \hat{f}(E) \end{pmatrix}, \quad \hat{f}(E) = f(E)\hat{I}, \end{aligned} \quad (\text{E.21})$$

las funciones de Green en equilibrio son

$$g_{LL}^{(+ -)}(E) = 2\pi i \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{f}_{LL,ee}(E) & 0 \\ 0 & \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{f}_{LL,hh}(E) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.22})$$

$$g_{LL}^{(- +)}(E) = -2\pi i \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) (\hat{I} - \hat{f}_{LL,ee}(E)) & 0 \\ 0 & \hat{\rho}_{LL,hh}(E) (\hat{I} - \hat{f}_{LL,hh}(E)) \end{pmatrix} \quad (\text{E.23})$$

$$g_{RR}^{(+ -)}(E) = 2\pi i \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{RR,ee}(E) \hat{f}(E) & \hat{\rho}_{RR,eh}(E) \hat{f}(E) \\ \hat{\rho}_{RR,he}(E) \hat{f}(E) & \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{f}(E) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.24})$$

$$g_{RR}^{(- +)}(E) = -2\pi i \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{RR,ee}(E) (\hat{I} - \hat{f}(E)) & \hat{\rho}_{RR,eh}(E) (\hat{I} - \hat{f}(E)) \\ \hat{\rho}_{RR,he}(E) (\hat{I} - \hat{f}(E)) & \hat{\rho}_{LL,hh}(E) (\hat{I} - \hat{f}(E)) \end{pmatrix} \quad (\text{E.25})$$

Teniendo en cuenta que las trazas no se modifican al intercambiar las matrices ($\text{Tr}(\text{ABC}) = \text{Tr}(\text{CAB}) = \text{Tr}(\text{BCA})$),

y usando

$$\hat{G}_{LR,he}^a = \hat{G}_{RL,eh}^{r*}, \quad (\text{E.26})$$

la corriente eléctrica es entonces

$$\begin{aligned}
I(E) = & 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(E) \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \hat{t} \right) \right. \\
& \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \left. \right] - 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \right. \right. \\
& \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,he}(E) + \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(E) \\
& \left. \left. \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \right) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] + 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \\
& \text{Tr} \left[\hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,hh}(E) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \\
& - 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\hat{t} \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,hh}(E) \hat{t} \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^{r*}(E) \hat{t} \right) \right. \\
& \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \left(\hat{f}_{L,h}(E) - \hat{f}(E) \right) \left. \right] - 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\hat{t} \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \hat{t} \right) \right. \right. \\
& \hat{\rho}_{RR,he}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) + \left(\hat{I} - \hat{t} \hat{G}_{RL,hh}^{r*}(E) \right) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \\
& \left. \left. \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,eh}(E) \right) \left(\hat{f}_{L,h}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] - 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \\
& \text{Tr} \left[\hat{t} \hat{G}_{RL,he}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,ee}(E) \left(\hat{f}_{L,h}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \\
& + 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \right. \right. \\
& \left. \left. + \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \right) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}_{L,h}(E) \right) \right]
\end{aligned} \tag{E.27}$$

La corriente se puede dividir en partes como

$$\begin{aligned}
I_1(E) &= 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(E) \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \hat{t} \right) \right. \\
&\quad \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) - \hat{t} \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,hh}(E) \\
&\quad \left. \hat{t} \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^{r*}(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \left(\hat{f}_{L,h}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \\
I_2(E) &= -4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \right. \right. \\
&\quad + \left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,he}(E) \right) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \\
&\quad + \left(\hat{t} \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,he}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\hat{I} - \hat{t} \hat{G}_{RL,hh}^{r*}(E) \right) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,eh}(E) \right) \left(\hat{f}_{L,h}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \\
I_3(E) &= 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,hh}(E) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right. \\
&\quad \left. - \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,ee}(E) \left(\hat{f}_{L,h}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \\
I_A(E) &= 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \right) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}_{L,h}(E) \right) \right]
\end{aligned} \tag{E.28}$$

Haciendo el cambio de variable $E \rightarrow -E$ en las integrales que involucran diferencias entre las funciones de Fermi de la forma $\left(\hat{f}_{L,h}(E) - \hat{f}(E) \right)$ y utilizando las propiedades de las funciones de Green

$$\begin{aligned}
\rho_{ii,ee}(E) &= \rho_{ii,hh}(-E), \quad \rho_{ii,eh}(E) = \rho_{ii,he}^*(E) = -\rho_{ii,he}^*(-E) \\
G_{ij,eh}^r(-E) &= G_{ij,he}^{r*}(E), \quad G_{ij,ee}^r(-E) = -G_{ij,hh}^{r*}(E)
\end{aligned} \tag{E.29}$$

La corriente es

$$I(E) = I_1(E) + I_2(E) + I_3(E) + I_A(E) \tag{E.30}$$

con

$$\begin{aligned}
I_1(E) &= 8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(E) \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right],
\end{aligned} \tag{E.31}$$

$$\begin{aligned}
I_2(E) &= -8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,he}(E) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right) \right],
\end{aligned} \tag{E.32}$$

$$I_3(E) = 8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,hh}(E) \left(\hat{f}_{L,e}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right], \quad (\text{E.33})$$

$$I_A(E) = 8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \right. \right. \quad (\text{E.34}) \\ \left. \left. + \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(E) \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^r(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(E) \right) \hat{f}_{L,e}(E) \right].$$

Para calcular la conductancia diferencial del sistema con base en grafeno se unen las contribuciones de la corriente que vienen de electron y hueco y se deriva la corriente con respecto al voltaje $\sigma = \frac{\partial I}{\partial V}$, teniendo en cuenta que $\frac{\partial f_e(E)}{\partial x} = \frac{\partial f(E-eV)}{\partial x} = e\delta(E-eV)$, por lo que las demás funciones dentro de la integral quedan evaluadas en eV . La conductancia asociada a cada línea de la integral es

$$\sigma_1(V) = 8\pi^2 \frac{e^2}{h} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(eV) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(eV) \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \right) \right] \quad (\text{E.35})$$

$$\sigma_2(V) = -8\pi^2 \frac{e^2}{h} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(eV) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(eV) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \right. \right. \quad (\text{E.36}) \\ \left. \left. + \left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) \right) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,he}(eV) \right) \right]$$

$$\sigma_3(V) = 8\pi^2 \frac{e^2}{h} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{RR,hh}(eV) \right) \right] \quad (\text{E.37})$$

$$\sigma_A(V) = 8\pi^2 \frac{e}{h} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^{r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \hat{t} \hat{G}_{RR,eh}^r(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(eV) \right. \right. \quad (\text{E.38}) \\ \left. \left. + \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^{r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(eV) \hat{t} \hat{G}_{RR,he}^r(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \right) \right]$$

Para normalizar se usa $\sigma_0 = \frac{4e^2}{h} \frac{(E_F+E)}{\pi\hbar v}$ con $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $\hat{t} = t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = t\hat{\sigma}_x$ y $t = \frac{P\hbar v}{2}$

$$\sigma_1(V) = \frac{2\pi^3 \hbar v P^2}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{\sigma}_x \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(eV) P \hat{\sigma}_x \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(eV) \hat{\sigma}_x \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) P \hat{\sigma}_x \right) \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \right) \right] \quad (\text{E.39})$$

$$\sigma_2(V) = -\frac{2\pi^3 \hbar v P^3}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{\sigma}_x \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(eV) P \hat{\sigma}_x \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \right. \right. \quad (\text{E.40}) \\ \left. \left. + \left(\hat{I} + P \hat{\sigma}_x \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) \right) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{RR,he}(eV) \right) \right],$$

$$\sigma_3(V) = \frac{2\pi^3 \hbar v P^4}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{\sigma}_x \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{RR,hh}(eV) \right) \right], \quad (\text{E.41})$$

$$\sigma_A(V) = \frac{2\pi^3 \hbar v P^4}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{\sigma}_x \hat{G}_{RR,eh}^{r*}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{G}_{RR,eh}^r(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,hh}(eV) \right. \right. \quad (\text{E.42}) \\ \left. \left. + \hat{\sigma}_x \hat{G}_{RR,he}^{r*}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,hh}(eV) \hat{\sigma}_x \hat{G}_{RR,he}^r(eV) \hat{\sigma}_x \hat{\rho}_{LL,ee}(eV) \right) \right].$$

E.1.2. Frontera “zigzag”

La corriente en el sistema GIS considerando fronteras tipo “zigzag” es

$$I(\tau) = \frac{e}{h} \text{Tr} \left[\tau_z \left(t G_{R,L}^{+,-}(\tau, \tau) - t^{*T} G_{L,R}^{+,-}(\tau, \tau) \right) \right] \quad (\text{E.43})$$

con

$$t = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -t^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.44})$$

Considerando la ecuación de Dyson y las relaciones entre las funciones de Green de Keldysh y las funciones retardada y avanzada la corriente puede ser escrita como

$$\begin{aligned} I(E) = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Tr} \tau_z & \left[t G_{RR}^{+,-}(0^+, 0^-) \Sigma_{RL}^a g_{LL}^a(-0^+, -0^-) + t G_{RR}^r(0^+, 0^-) \right. \\ & \Sigma_{RL}^r g_{LL}^{+,-}(-0^+, -0^-) - t^{*T} g_{LL}^{+,-}(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR}^a G_{RR}^a(0^+, 0^-) \\ & \left. - t^{*T} g_{LL}^r(-0^+, -0^-) \Sigma_{LR}^r G_{RR}^{+,-}(0^+, 0^-) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.45})$$

considerando que $\Sigma_{RL}^a = t \Sigma_{LR}^a = t^{T*} = t^T$, y que $G^a - G^r = G^{+-} - G^{-+}$ la corriente es

$$I(E) = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Tr} \sigma_z \left[t g_{LL}^{+,-}(-0^+, -0^-) t^T G_{RR}^{-+}(0^+, 0^-) - t g_{LL}^{-+}(-0^+, -0^-) t^T G_{RR}^{+-}(0^+, 0^-) \right] \quad (\text{E.46})$$

Teniendo en cuenta que τ_z y t conmutan, considerando el sistema como uno de dos dimensiones,

$$t = \begin{pmatrix} \hat{t} & 0 \\ 0 & -\hat{t} \end{pmatrix}, \quad \hat{t} = t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.47})$$

y las funciones de Green pueden escribirse como

$$g_{LL}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) & 0 \\ 0 & \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.48})$$

$$g_{RR}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) = \begin{pmatrix} \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) & \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \\ \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) & \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.49})$$

$$G_{RL}^r(0^+, -0^-) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) & \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \\ \hat{G}_{RL,he}^r(0^+, -0^-) & \hat{G}_{RL,hh}^r(0^+, -0^-) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.50})$$

$$G_{LR}^a(-0^+, 0^-) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{LR,ee}^a(-0^+, 0^-) & \hat{G}_{LR,eh}^a(-0^+, 0^-) \\ \hat{G}_{LR,he}^a(-0^+, 0^-) & \hat{G}_{LR,hh}^a(-0^+, 0^-) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.51})$$

$$G_{RR}^r(0^+, 0^-) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RR,ee}^r(0^+, 0^-) & \hat{G}_{RR,eh}^r(0^+, 0^-) \\ \hat{G}_{RR,he}^r(0^+, 0^-) & \hat{G}_{RR,hh}^r(0^+, 0^-) \end{pmatrix}, \quad (\text{E.52})$$

$$G_{RR}^a(0^+, 0^-) = \begin{pmatrix} \hat{G}_{RR,ee}^a(0^+, 0^-) & \hat{G}_{RR,eh}^a(0^+, 0^-) \\ \hat{G}_{RR,he}^a(0^+, 0^-) & \hat{G}_{RR,hh}^a(0^+, 0^-) \end{pmatrix}. \quad (\text{E.53})$$

La corriente puede ser escrita como

$$\begin{aligned} I(E) = & \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^{(- +)}(0^+, 0^-) - \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \right. \\ & \left. \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^{(+ -)}(0^+, 0^-) \right] - \text{Tr} \left[\hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,hh}^{(- +)}(0^+, 0^-) \right. \\ & \left. - \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,hh}^{(+ -)}(0^+, 0^-) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.54})$$

En este caso la ecuación que relaciona las funciones de Green de no equilibrio con las funciones retardada y avanzada es

$$\begin{aligned} G_{RR}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) = & [I + G_{RL}^r(0^+, -0^-) t^T] g_{RR}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) [I + t G_{LR}^a(-0^+, 0^-)] \\ & + G_{RR}^r(0^+, 0^-) t g_{LL}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) t^T G_{RR}^a(0^+, 0^-) \end{aligned} \quad (\text{E.55})$$

Escribiendo esta función de Green utilizando matrices 2×2 , donde solo son necesarias las componentes $G_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-)$ y $G_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-)$ se tiene

$$\begin{aligned} G_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(E) = & \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \\ & + \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,ee}^a(-0^+, 0^-) \\ & - \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{LR,ee}^a(-0^+, 0^-) \right) \\ & - \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,he}^a(-0^+, 0^-) \\ & + \hat{G}_{RR,ee}^r(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^a(0^+, 0^-) \\ & + \hat{G}_{RR,eh}^r(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,he}^a(0^+, 0^-) \\ & + \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,he}^a(-0^+, 0^-) \end{aligned} \quad (\text{E.56})$$

$$\begin{aligned}
G_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(E) = & \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) - \hat{G}_{RL,hh}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \\
& + \hat{G}_{RL,he}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \left(\hat{I} - \hat{t} \hat{G}_{LR,hh}^a(-0^+, 0^-) \right) \\
& + \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \right) \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,eh}^a(-0^+, 0^-) \\
& - \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \right) \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,hh}^a(-0^+, 0^-) \\
& + \hat{G}_{RL,he}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,eh}^a(-0^+, 0^-) \\
& + \hat{G}_{RR,he}^r(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^a(0^+, 0^-) \\
& + \hat{G}_{RR,hh}^r(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)(- +)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,hh}^a(0^+, 0^-)
\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que las trazas no se modifican al intercambiar las matrices ($\text{Tr}(\text{ABC}) = \text{Tr}(\text{CAB}) = \text{Tr}(\text{BCA})$)

$$\begin{aligned}
& \left(\hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^{+-}(0^+, 0^-) - \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^{+-}(0^+, 0^-) \right) \\
= & \hat{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \right) \left(\hat{g}_{RR,ee}^{(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)}(0^+, 0^-) \right. \\
& \left. \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \right) + \hat{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \right) \left(\hat{g}_{RR,ee}^{(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \right. \\
& \left. \hat{G}_{LR,ee}^a(-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,ee}^a(-0^+, 0^-) \right. \\
& \left. \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \right) - \left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{LR,ee}^a(-0^+, 0^-) \right) \hat{t} \left(\hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \right. \\
& \left. \hat{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{g}_{RR,he}^{(- +)}(0^+, 0^-) - \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \right. \\
& \left. \hat{t}^T \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)}(0^+, 0^-) \right) - \hat{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \right) \left(\hat{g}_{RR,eh}^{(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \right. \\
& \left. \hat{G}_{LR,he}^a(-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,he}^a(-0^+, 0^-) \right. \\
& \left. \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \right) + \hat{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^r(0^+, 0^-) \hat{t} \left(\hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^a(0^+, 0^-) \right. \\
& \left. \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) - \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,ee}^a(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \right) \\
& + \hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^r(0^+, 0^-) \hat{t} \left(\hat{g}_{LL,hh}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^a(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \right. \\
& \left. - \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^a(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) \right) - \hat{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \hat{t}^T \\
& \left(\hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,he}^a(-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(- +)}(-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,hh}^{(- +)}(0^+, 0^-) \hat{t} \right. \\
& \left. \hat{G}_{LR,he}^a(-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)}(-0^+, -0^-) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,hh}^{-+} (0^+, 0^-) - \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,hh}^{+-} (0^+, 0^-) \right) \\
= & \tilde{t}^T \left(I - \hat{G}_{RL,hh}^r (0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \left(\hat{g}_{RR,hh}^{(- +)} (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)} (0^+, 0^-) \right. \\
& \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \left. \right) + \tilde{t}^T \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r (0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \left(\hat{g}_{RR,he}^{(- +)} (0^+, 0^-) \hat{t} \right. \\
& \hat{G}_{LR,eh}^a (-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,he}^{(+ -)} (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,eh}^a (-0^+, 0^-) \hat{t} \\
& \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \left. \right) + \tilde{t}^T \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r (0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \left(\hat{g}_{RR,hh}^{(+ -)} (0^+, 0^-) \hat{t} \right. \\
& \hat{G}_{LR,hh}^a (-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,hh}^{(- +)} (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,hh}^a (-0^+, 0^-) \\
& \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) \left. \right) + \left(\hat{I} - \hat{t} \hat{G}_{LR,hh}^a (-0^+, 0^-) \right) \hat{t} \left(\hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) \right. \\
& \tilde{t}^T \hat{G}_{RL,he}^r (0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{g}_{RR,eh}^{(- +)} (0^+, 0^-) - \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RL,he}^r (0^+, -0^-) \\
& \tilde{t}^T \hat{g}_{RR,eh}^{(+ -)} (0^+, 0^-) \left. \right) + \tilde{t}^T \hat{G}_{RL,he}^r (0^+, -0^-) \tilde{t}^T \left(\hat{g}_{RR,ee}^{(- +)} (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,eh}^a (-0^+, 0^-) \hat{t} \right. \\
& \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) - \hat{g}_{RR,ee}^{(+ -)} (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{LR,eh}^a (-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \left. \right) \\
& + \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,he}^r (0^+, 0^-) \hat{t} \left(\hat{g}_{LL,ee}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^a (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) \right. \\
& - \hat{g}_{LL,ee}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^a (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \left. \right) + \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,hh}^r (0^+, 0^-) \hat{t} \\
& \left(\hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,hh}^a (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) - \hat{g}_{LL,hh}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right. \\
& \left. \hat{G}_{RR,hh}^a (0^+, 0^-) \hat{t} \hat{g}_{LL,hh}^{(- +)} (-0^+, -0^-) \right)
\end{aligned}$$

donde hemos usando

$$\hat{G}_{LR,he}^a = \hat{G}_{RL,eh}^{r*T}$$

Utilizando las siguiente relaciones para las funciones de Green en equilibrio para cada contacto

$$\begin{aligned}
g_{LL}^{(+ -)} (-0^+, -0^-) &= 2\pi i \rho_{LL} (-0^+, -0^-) f_{LL}(E), \\
g_{LL}^{(- +)} (-0^+, -0^-) &= -2\pi i \rho_{LL} (-0^+, -0^-) (I - f_{LL}(E)) \\
g_{RR}^{(+ -)} (0^+, 0^-) &= 2\pi i \rho_{RR} (0^+, 0^-) f(E), \\
g_{RR}^{(- +)} (0^+, 0^-) &= -2\pi i \rho_{RR} (0^+, 0^-) (I - f(E))
\end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned}
\rho_{LL} (-0^+, -0^-) &= \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{LL,ee} (-0^+, -0^-) & 0 \\ 0 & \hat{\rho}_{LL,hh} (-0^+, -0^-) \end{pmatrix}, \\
\rho_{RR} (0^+, 0^-) &= \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{RR,ee} (0^+, 0^-) & \hat{\rho}_{RR,eh} (0^+, 0^-) \\ \hat{\rho}_{RR,he} (0^+, 0^-) & \hat{\rho}_{LL,hh} (0^+, 0^-) \end{pmatrix} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} (g_{RR}^r (0^+, 0^-)),
\end{aligned}$$

y teniendo en cuenta que las matrices $\hat{f}(E)$, \hat{t} y $\hat{\rho}_{LL,ee}(E)$, la corriente es

$$I(E) = I_1(E) + I_2(E) + I_3(E) + I_A(E) \quad (\text{E.57})$$

con

$$I_1(E) = 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\tilde{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,ee}(0^+, 0^-) \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(-0^+, 0^-) \right) \right. \\ \left. \hat{\rho}_{LL,ee}(-0^+, -0^-) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) - \tilde{t}^T \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,hh}(0^+, 0^-) \right. \\ \left. \hat{t} \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^{r*}(-0^+, 0^-) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{LL,hh}(-0^+, -0^-) \left(\hat{f}_{LL,hh}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \quad (\text{E.58})$$

$$I_2(E) = -4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(-0^+, 0^-) \right) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \right. \right. \\ \left. \left. \tilde{t}^T \hat{\rho}_{RR,he}(0^+, 0^-) + \tilde{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,eh}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(-0^+, 0^-) \hat{t} \right. \right. \\ \left. \left. \hat{\rho}_{LL,ee}(-0^+, -0^-) \right) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) + \left(\tilde{t}^T \left(\hat{I} - \hat{G}_{RL,hh}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,he}(0^+, 0^-) \right. \right. \\ \left. \left. \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^{r*}(-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(-0^+, -0^-) + \left(\hat{I} - \hat{t} \hat{G}_{RL,hh}^{r*}(-0^+, 0^-) \right) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(-0^+, -0^-) \right. \right. \\ \left. \left. \tilde{t}^T \hat{G}_{RL,he}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{\rho}_{RR,eh}(0^+, 0^-) \right) \left(\hat{f}_{LL,hh}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \quad (\text{E.59})$$

$$I_3(E) = 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(0^+, -0^-) \right. \\ \left. \tilde{t}^T \hat{\rho}_{RR,hh}(0^+, 0^-) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) - \hat{t} \hat{G}_{RL,he}^{r*}(-0^+, 0^-) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(-0^+, -0^-) \right. \\ \left. \tilde{t}^T \hat{G}_{RL,he}^r(0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{\rho}_{RR,ee}(0^+, 0^-) \left(\hat{f}_{LL,hh}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \quad (\text{E.60})$$

$$I_A(E) = 4\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\tilde{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{r*}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^r(0^+, 0^-) \hat{t} \right. \right. \\ \left. \left. \hat{\rho}_{LL,hh}(-0^+, -0^-) + \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{r*}(0^+, 0^-) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}(-0^+, -0^-) \tilde{t}^T \hat{G}_{RR,he}^r(0^+, 0^-) \right. \right. \\ \left. \left. \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}(-0^+, -0^-) \right) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}_{LL,hh}(E) \right) \right] \quad (\text{E.61})$$

La corriente es esencialmente igual a la encontrada para la frontera “armchair”, pero en este caso la matriz de acople no es la misma de izquierda a derecha que de derecha a izquierda por lo que se diferencia \hat{t} y \tilde{t}^T , además se mantienen los argumentos espaciales de las funciones de Green fuera del equilibrio para diferenciar las funciones con argumento $(0^+, 0^-)$ y $(0^+, -0^-)$ que corresponden a aquellas con $x > x'$ y $(-0^+, -0^-)$ que corresponden a aquellas con $x < x'$. Haciendo un cambio de variable de $E \rightarrow -E$ a las componentes de la corriente relacionadas con $\hat{f}_{LL,hh}(E)$ y utilizando las propiedades de las funciones de green y de la densidad de estados con argumento negativo, la corriente es

$$\begin{aligned}
I_1(E) &= 8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,ee}^>(E) \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{LL,ee}^<(E) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right] \\
I_2(E) &= -8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(E) \right) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(E) \hat{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t}^T \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \hat{\rho}_{RR,he}^>(E) + \hat{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(E) \hat{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,eh}^>(E) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(E) \right) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) \right] \\
I_3(E) &= 8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(E) \hat{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(E) \hat{t}^T \hat{\rho}_{RR,hh}^>(E) \left(\hat{f}_{LL,ee}(E) - \hat{f}(E) \right) \right) \right] \\
I_A(E) &= 8\pi^2 \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(E) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^<(E) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r*}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^<(E) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r}(E) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(E) \right) \hat{f}_{LL,ee}(E) \right]
\end{aligned}$$

La conductancia normalizada con respecto a $\sigma_n = \frac{4e^2}{h} \frac{(E_F+E)}{\pi\hbar v}$ es

$$\sigma_1(V) = \frac{2\pi^3 \hbar v}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(eV) \hat{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,ee}^>(eV) \hat{t} \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) \hat{t} \right) \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \right) \right] \quad (\text{E.66})$$

$$\begin{aligned}
\sigma_2(V) &= -\frac{2\pi^3 \hbar v}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\left(\hat{I} + \hat{t} \hat{G}_{RL,ee}^{r*}(eV) \right) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \hat{t}^T \hat{\rho}_{RR,he}^>(eV) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \hat{t}^T \left(\hat{I} + \hat{G}_{RL,ee}^r(eV) \hat{t}^T \right) \hat{\rho}_{RR,eh}^>(eV) \hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \right) \right]
\end{aligned} \quad (\text{E.67})$$

$$\sigma_3(V) = \frac{2\pi^3 \hbar v}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t} \hat{G}_{RL,eh}^{r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RL,eh}^r(eV) \hat{t}^T \hat{\rho}_{RR,hh}^>(eV) \right) \right] \quad (\text{E.68})$$

$$\begin{aligned}
\sigma_A(V) &= \frac{2\pi^3 \hbar v}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^<(eV) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^<(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \right) \right]
\end{aligned} \quad (\text{E.69})$$

la conductancia se puede definir a partir de la corriente

$$I_S = 2N(0)ev \int_{-\infty}^{\infty} [f_0(E - eV) - f_0(E)] [1 + R_{e-h}(E) - R_{e-e}(E)] dE \quad (\text{E.70})$$

como

$$\sigma_S = 2N(0)e^2v [1 + R_{e-h}(E) - R_{e-e}(E)] \quad (\text{E.71})$$

la conductancia diferencial es

$$\begin{aligned}
\sigma_A &= 8\pi^2 \frac{e^2}{h} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^<(eV) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^<(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^<(eV) \right) \right]
\end{aligned} \quad (\text{E.72})$$

la contribución debida a las reflexiones de Andreev normalizada es

$$\sigma_A = 2N(0)e^2vR_{e-h}(E) \quad (\text{E.73})$$

al compararse con la contribución encontrada siguiendo el formalismo de las funciones de Green fuera del equilibrio es posible encontrar el coeficiente de reflexión electrón - hueco

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$R_{e-h}(E) = \frac{\sigma_A}{2N(0)e^2v} \quad (\text{E.74})$$

$$R_{e-h}(E) = \frac{2\pi^2}{(E_F + E)} \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^{<}(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,eh}^{>r}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^{<}(eV) \right. \right. \\ \left. \left. + \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r*}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,hh}^{<}(eV) \hat{t}^T \hat{G}_{RR,he}^{>r}(eV) \hat{t} \hat{\rho}_{LL,ee}^{<}(eV) \right) \right] \quad (\text{E.75})$$

E.2. Juntura grafeno - película de grafeno - superconductor

Teniendo en cuenta que la corriente para los dos tipos de fronteras puede escribirse como

$$I = \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \tau_z [t g_{LL}^{+-}(E) t^T G_{RR}^{+-}(E) - t g_{LL}^{-+}(E) t^T G_{RR}^{+-}(E)] \quad (\text{E.76})$$

con \hat{g} y \hat{t} determinadas por el tipo de frontera entre los componentes de la juntura y

$$\tau_z = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (\text{E.77})$$

Para la juntura grafeno - película de grafeno - superconductor se considera la película de grafeno como un contacto entre el grafeno y el superconductor, las fronteras de esta película están en a y a' y la función de Green de acople puede escribirse teniendo en cuenta el acople con el grafeno al lado izquierdo y el superconductor a la derecha de la película $\hat{G}_{RR}^{-+ (+-)}(E)$ puede escribirse utilizando la ecuación de Dyson como

$$G_{aa}^\gamma = G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r g_{LL}^\gamma \Sigma_{La}^a G_{aa}^a + G_{aa'}^r \Sigma_{a'S}^r g_{SS,a'a'}^\gamma \Sigma_{Sa'}^a G_{a'a}^a, \quad (\text{E.78})$$

con $\gamma = + - (-+)$. Reemplazando \hat{G}_{aa}^γ en la expresión para la corriente

$$I = \frac{e}{h} \int dE \text{Tr} \tau_z [t g_{LL}^{+-}(E) t^T \left(G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r g_{LL}^{-+} \Sigma_{La}^a G_{aa}^a + G_{aa'}^r \Sigma_{a'S}^r g_{SS,a'a'}^{-+} \Sigma_{Sa'}^a G_{a'a}^a \right) \\ - t g_{LL}^{-+}(E) t^T \left(G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r g_{LL}^{+-} \Sigma_{La}^a G_{aa}^a + G_{aa'}^r \Sigma_{a'S}^r g_{SS,a'a'}^{+-} \Sigma_{Sa'}^a G_{a'a}^a \right)] \quad (\text{E.79})$$

con

$$g_{LL}^{+-}(E) = 2\pi i \rho_{LL} f_{LL}, \quad g_{LL}^{-+}(E) = -2\pi i \rho_{LL} (I - f_{LL}) \quad (\text{E.80})$$

y

$$g_{SS,a'a'}^{+-}(E) = 2\pi i \rho_{SS,a'a'} f, \quad g_{S,a'a'}^{-+}(E) = -2\pi i \rho_{S,a'a'} (I - f) \quad (\text{E.81})$$

la corriente es

$$I = \frac{4\pi^2 e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Tr} \tau_z \left[t_L \rho_{LL} \left((f_{LL} t_L^T G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r \rho_{LL} - t_L^T G_{aa}^r \Sigma_{aL}^r \rho_{LL} f_{LL}) \Sigma_{La}^a G_{aa}^a \right. \right. \\ \left. \left. + (f_{LL} - f) t_L G_{aa}^r \Sigma_{a'S}^r \rho_{SS,a'a'} \Sigma_{S a'}^a G_{a'a}^a \right) \right] \quad (\text{E.82})$$

Escribiendo las matrices en el espacio de los contactos, y separando las contribuciones de la corriente debidas a las dispersiones de Andreev I_A y a cuasipartículas I_q , se tiene que para la componente de Andreev utilizando las propiedades de las funciones de Green y las densidad de estados cuando el argumento es $-E$ para el segundo término de la corriente es

$$I_A = \frac{16e\pi^2}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{t}_L \hat{\rho}_{LL,ee} \hat{t}_L^T \hat{G}_{aa,eh}^r \hat{t}_L \hat{\rho}_{LL,hh} \hat{t}_L^T \hat{G}_{aa,he}^a \right) \right] \hat{f}_{LL,ee} \quad (\text{E.83})$$

Definiendo

$$\hat{\Sigma}_{ee} = \pi \hat{t}_L \hat{\rho}_{LL,ee} \hat{t}_L^T \text{ y } \hat{\Sigma}_{hh} = \pi \hat{t}_L \hat{\rho}_{LL,hh} \hat{t}_L^T \quad (\text{E.84})$$

La corriente es

$$I_A = \frac{16e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{\Sigma}_{ee} \hat{G}_{aa,eh}^r \hat{\Sigma}_{hh} \hat{G}_{aa,he}^a \right) \hat{f}_{LL,ee} \right] \quad (\text{E.85})$$

El segundo término de la corriente también puede ser escrito en función de las funciones de Green en el subespacio de los contactos, utilizando las propiedades de las funciones de Green y la densidad de estado la corriente I_q es

$$I_q = \frac{8e\pi^2}{h} \int dE \text{Tr} \left[\left(\hat{f}_{LL,ee} - \hat{f} \right) \hat{t}_L \hat{\rho}_{LL,ee} \hat{t}_L^T \left(\hat{G}_{aa',ee}^r \hat{t}_R^T \left(\hat{\rho}_{SS,a'a',ee} \hat{t}_R \hat{G}_{a'a,ee}^a - \hat{\rho}_{SS,a'a',eh} \hat{t}_R \hat{G}_{a'a,he}^a \right) \right. \right. \\ \left. \left. - \hat{G}_{aa',eh}^r \hat{t}_R^T \left(\hat{\rho}_{SS,a'a',he} \hat{t}_R \hat{G}_{a'a,ee}^a - \hat{\rho}_{SS,a'a',hh} \hat{t}_R \hat{G}_{a'a,he}^a \right) \right) \right] \quad (\text{E.86})$$

definiendo

$$\hat{\Sigma}_{See} = \pi \hat{t}_R^T \hat{\rho}_{SS,a'a',ee} \hat{t}_R, \quad \hat{\Sigma}_{Seh} = \pi \hat{t}_R^T \hat{\rho}_{SS,a'a',eh} \hat{t}_R, \\ \hat{\Sigma}_{She} = \pi \hat{t}_R^T \hat{\rho}_{SS,a'a',he} \hat{t}_R, \quad \hat{\Sigma}_{Shh} = \pi \hat{t}_R^T \hat{\rho}_{SS,a'a',hh} \hat{t}_R, \quad (\text{E.87})$$

la corriente puede ser escrita como

$$I_q = \frac{8e}{h} \int dE \text{Tr} \left[\text{Re} \left(\hat{\Sigma}_{ee} \left(\hat{G}_{aa',ee}^r \left(\hat{\Sigma}_{See} \hat{G}_{a'a,ee}^a - \hat{\Sigma}_{Seh} \hat{G}_{a'a,he}^a \right) \right. \right. \right. \\ \left. \left. - \hat{G}_{aa',eh}^r \left(\hat{\Sigma}_{She} \hat{G}_{a'a,ee}^a - \hat{\Sigma}_{Shh} \hat{G}_{a'a,he}^a \right) \right) \right) \left(\hat{f}_{LL,ee} - \hat{f} \right) \right] \quad (\text{E.88})$$

Para el caso de frontera “armchair”

$$\hat{t}_R = t_R \sigma_x = \hat{t}_R^T \text{ y } \hat{t}_L = t_L \sigma_x = \hat{t}_L^T \quad (\text{E.89})$$

Para frontera “zigzag”

$$\hat{t}_R = t_R \sigma_1 \text{ y } \hat{t}_L = t_L \sigma_1$$

con $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Para encontrar una expresión analítica para la corriente en este caso es necesario calcular las densidades de estado en las regiones correspondiente a el grafeno semi-infinito, la películas y el superconductor, estas densidades son, para el caso del grafeno

$$\rho_{LL} = \begin{pmatrix} \rho_{LLee} & 0 \\ 0 & \rho_{LLhh} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\pi\hbar v} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & e^{-i\alpha_e} + e^{i\alpha_e} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & e^{-i\alpha_h} + e^{i\alpha_h} \end{pmatrix}, \quad (\text{E.90})$$

para el superconductor

$$\rho_{SS} = \frac{i}{2\pi} (g_S^> - g_S^{>*T}) = \frac{1}{2\pi\hbar v} \begin{pmatrix} 2e_1 & 1 & 2\frac{\Delta}{\Omega}E_1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2\frac{\Delta}{\Omega}E_1 & 0 & -2e_2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{E.91})$$

Además las funciones de Fermi en este caso corresponden a una matriz de la forma

$$\tilde{f}_{LL} = \begin{pmatrix} f_{LLee} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f_{LLee} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f_{LLhh} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_{LLhh} \end{pmatrix} \quad (\text{E.92})$$

Para encontrar la componente correspondiente a la contribución de Andreev a la corriente

$$I_A = t^4 \frac{4\pi^2 e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Tr} \tau_z \left[\tau \tilde{\rho}_{LL} \left(\left(\tilde{f}_{LL} \tau^T \tilde{G}_{aa}^r \tau^T \tilde{\rho}_{LL} - \tau^T \tilde{G}_{aa}^r \tau^T \tilde{\rho}_{LL} \tilde{f}_{LL} \right) \tau \tilde{G}_{aa}^a \right) \right] \quad (\text{E.93})$$

La traza de la matriz de I_A es

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \tau_z \left[\tau \tilde{\rho}_{LL} \left(\left(\tilde{f}_{LL} \tau^T \tilde{G}_{aa}^r \tau^T \tilde{\rho}_{LL} - \tau^T \tilde{G}_{aa}^r \tau^T \tilde{\rho}_{LL} \tilde{f}_{LL} \right) \tau \tilde{G}_{aa}^a \right) \right] \\ &= \text{Tr} \begin{pmatrix} \rho_{22}\rho_{44}G_{13}G_{13}^* & \rho_{22}\rho_{44}G_{13}G_{23}^* & \rho_{22}\rho_{44}G_{13}G_{33}^* & \rho_{22}\rho_{44}G_{13}G_{43}^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \rho_{22}\rho_{44}G_{31}G_{11}^* & \rho_{22}\rho_{44}G_{31}G_{21}^* & \rho_{22}\rho_{44}G_{31}G_{31}^* & \rho_{22}\rho_{44}G_{31}G_{41}^* \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{E.94})$$

Para electrones

$$\text{Tre} = \frac{(f_{eL} - f_{Lh})}{\pi^2 \hbar^2 v^2} |G_{13}|^2 \rho_{22} \rho_{44} = \frac{(f_{eL} - f_{Lh})}{\pi^2 \hbar^2 v^2} \frac{1}{\hbar^2 v^2} \left| \frac{t_1^2}{DD_e D_h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e d_h \right|^2 \cos \alpha_e \cos \alpha_h \quad (\text{E.95})$$

Para huecos

$$\text{Trh} = \frac{(f_{eL} - f_{Lh})}{\pi^2 \hbar^2 v^2} |G_{31}|^2 \rho_{22} \rho_{44} = \frac{(f_{eL} - f_{Lh})}{\pi^2 \hbar^2 v^2} \frac{1}{\hbar^2 v^2} \left| \frac{t_1^2}{DD_e D_h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e d_h \right|^2 \cos \alpha_h \cos \alpha_e \quad (\text{E.96})$$

La corriente es entonces

$$I_{Ae} = \frac{4e}{h} t^4 t_1^4 \int_{-\infty}^{\infty} dE (f_{eL} - f_{Lh}) \left| \frac{1}{DD_e D_h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e d_h \right|^2 \cos \alpha_e \cos \alpha_h, \quad (\text{E.97})$$

$$I_{Ah} = \frac{4e}{h} t^4 t_1^4 \int_{-\infty}^{\infty} dE (f_{eL} - f_{Lh}) \left| \frac{1}{DD_e D_h} \frac{\Delta}{\Omega} E_1 d_e d_h \right|^2 \cos \alpha_e \cos \alpha_h. \quad (\text{E.98})$$

Ahora para la componente de la corriente correspondiente a las cuasipartículas

$$I_q = \frac{4\pi^2 e}{h} t^2 t_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Tr} \left(\tau_z \tau \tilde{\rho}_{LL} \left(\tilde{f}_{LL} \tau^T \tilde{G}_{aa'}^r \tau^T \tilde{\rho}_{SS} - \tau^T \tilde{G}_{aa'}^r \tau^T \tilde{\rho}_{SS}, \tilde{f} \right) \tau \tilde{G}_{a'a}^a \right), \quad (\text{E.99})$$

la traza para electrones de la matriz en I_q es

$$\begin{aligned} \text{Tre} &= (f - f_{eL}) \rho_{22L} (G_{14}^* (\rho_{13} G_{12} - \rho_{33} G_{14}) - G_{12}^* (\rho_{11} G_{12} - \rho_{31} G_{14})) \\ &= \frac{-(f - f_{eL})}{\pi^2 \hbar^2 v^2} \frac{|d_e|^2}{|DD_e|^2} \frac{1}{\hbar^2 v^2} \left(e_1 |(1 - t_1^2 b e_2)|^2 - t_1^2 \left| \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \right|^2 (2Reb^* - t_1^2 e_2 |b|^2) \right) \cos \alpha_e \end{aligned} \quad (\text{E.100})$$

para huecos

$$\begin{aligned} \text{Trh} &= (f - f_{Lh}) \rho_{44L} (G_{32}^* (\rho_{11} G_{32} - \rho_{31} G_{34}) - G_{34}^* (\rho_{13} G_{32} - \rho_{33} G_{34})) \\ &= \frac{-(f - f_{Lh})}{\pi^2 \hbar^2 v^2} \frac{|d_h|^2}{|DD_h|^2} \frac{1}{\hbar^2 v^2} \left(e_2 |(1 + t_1^2 e_1 a)|^2 + t_1^2 \left| \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \right|^2 (2Rea^* + t_1^2 e_1 |a|^2) \right) \cos \alpha_h \end{aligned} \quad (\text{E.101})$$

Reemplazando este resultado en la corriente

$$I_{qe} = \frac{4e}{h} t^2 t_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE (f_{Le} - f) \frac{|d_e|^2}{|DD_e|^2} \left(e_1 |(1 - t_1^2 b e_2)|^2 - t_1^2 \left| \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \right|^2 (2Reb^* - t_1^2 e_2 |b|^2) \right) \cos \alpha_e, \quad (\text{E.102})$$

$$I_{qh} = \frac{4e}{h} t^2 t_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE (f_{Lh} - f) \frac{|d_h|^2}{|DD_h|^2} \left(e_2 \left| (1 + t_1^2 e_1 a) \right|^2 + t_1^2 \left| \frac{\Delta}{\Omega} E_1 \right|^2 \left(2 \text{Re} a^* + t_1^2 e_1 |a|^2 \right) \right) \cos \alpha_h, \quad (\text{E.103})$$

BIBLIOGRAFÍA

- [1] W. Meissner and R. Ochsenfeld, *Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit* *Naturwissenschaften* **21** 787–788(1933) .
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* *Phys. Rev.* **108** 1175(1957) .
- [3] P. G. de Gennes, *Superconductivity of metals and alloys*. Benjamin, New York, 1966.
- [4] I. Giaever, “Electron Tunneling and Superconductivity. ,” in *Nobel Lectures Physics 1971 – 80*, Stig Lundqvist, ed. (World Scientific), 1992.
- [5] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Possible high T_C superconductivity in the Ba-La-Cu-O system* *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **64** 189–193(1986) .
- [6] G. Deutscher, *Andreev – Saint – James reflections: A probe of cuprate superconductors* *Rev. Mod. Phys.* **77** 109–135(2005) .
- [7] C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, *Phase-Sensitive Evidence for d-Wave Pairing Symmetry in Electron-Doped Cuprate Superconductors* *Phys. Rev. Lett.* **85** 182–185(2000) .
- [8] S. Kashiwaya, Y. Tanaka, M. Koyanagi, and K. Kajimura, *Bound States in Superconductors* *Japanese Journal of Applied Physics* **34** 4555–4558(1995) .
- [9] V. Z. Kresin and S. A. Wolf, *Colloquium: Electron-lattice interaction and its impact on high T_c superconductivity* *Rev. Mod. Phys.* **81** 481–501(2009) .
- [10] T. Dahm, V. Hinkov, S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, V. B. Zabolotnyy, J. Fink, B. Buchner, D. J. Scalapino, W. Hanke, and B. Keimer, *Strength of the spin – fluctuation-mediated pairing interaction in a high – temperature superconductor* *Nat. Phys.* **5** 217–221(2009) .
- [11] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, *Iron-Based Layered Superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x = 0.05\text{--}0.12$) with $T_c = 26\text{ K}$* *Journal of the American Chemical Society* **130** 3296–3297(2008) .

- [12] M. M. Korshunov and I. Eremin, *Theory of magnetic excitations in iron - based layered superconductors* *Phys. Rev. B* **78** 140509(2008) .
- [13] T. A. Maier and D. J. Scalapino, *Theory of neutron scattering as a probe of the superconducting gap in the iron pnictides* *Phys. Rev. B* **78** 020514(2008) .
- [14] M. D. Lumsden, A. D. Christianson, D. Parshall, M. B. Stone, S. E. Nagler, G. J. MacDougall, H. A. Mook, K. Lokshin, T. Egami, D. L. Abernathy, E. A. Goremychkin, R. Osborn, M. A. McGuire, A. S. Sefat, R. Jin, B. C. Sales, and D. Mandrus, *Two-dimensional resonant magnetic excitation in $BaFe_{1.84}Co_{0.16}As_2$* *Phys. Rev. Lett.* **102** 107005(2009) .
- [15] F. Wang, H. Zhai, and D.-H. Lee, *Antiferromagnetic correlation and the pairing mechanism of the cuprates and iron pnictides: A view from the functional renormalization group studies* *EPL (Europhysics Letters)* **85** no. 3, 37005(2009) .
- [16] Y.-Y. Zhang, C. Fang, X. Zhou, K. Seo, W.-F. Tsai, B. A. Bernevig, and J. Hu, *Quasiparticle scattering interference in superconducting iron pnictides* *Phys. Rev. B* **80** 094528(2009) .
- [17] N. Bulut and D. J. Scalapino, *Weak-coupling model of spin fluctuations in the superconducting state of the layered cuprates* *Phys. Rev. B* **45** 2371–2384(1992) .
- [18] G. R. Boyd, T. P. Devereaux, P. J. Hirschfeld, V. Mishra, and D. J. Scalapino, *Probing the pairing symmetry of the iron pnictides with electronic Raman scattering* *Phys. Rev. B* **79** 174521(2009) .
- [19] H. Ding, P. Richard, K. Nakayama, K. Sugawara, T. Arakane, Y. Sekiba, A. Takayama, S. Souma, T. Sato, T. Takahashi, Z. Wang, X. Dai, Z. Fang, G. F. Chen, J. L. Luo, and N. L. Wang, *Observation of Fermi surface dependent nodeless superconducting gaps in $Ba_{0.6}K_{0.4}Fe_2As_2$* *EPL (Europhysics Letters)* **83** 47001(2008) .
- [20] J. W. Ekin, Y. Xu, S. Mao, T. Venkatesan, D. W. Face, M. Eddy, and S. A. Wolf, *Correlation between d-wave pairing behavior and magnetic-field-dependent zero-bias conductance peak* *Phys. Rev. B* **56** 13746–13749(1997) .
- [21] M. Aprili, M. Covington, E. Paraoanu, B. Niedermeier, and L. H. Greene, *Tunneling spectroscopy of the quasiparticle Andreev bound state in ion – irradiated $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ / Pb junctions* *Phys. Rev. B* **57** R8139–R8142(1998) .
- [22] L. Alff, H. Takashima, S. Kashiwaya, N. Terada, H. Ihara, Y. Tanaka, M. Koyanagi, and K. Kajimura, *Spatially continuous zero-bias conductance peak on (110) $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ surfaces* *Phys. Rev. B* **55** R14757–R14760(1997) .
- [23] J. Kane, Q. Chen, K. W. Ng, and H. J. Tao, *Observation of a-b plane gap anisotropy in $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$ with a low temperature scanning tunneling microscope* *Phys. Rev. Lett.* **72** 128–131(1994) .
- [24] W. Wang, M. Yamazaki, K. Lee, and I. Iguchi, *Observation of quasiparticle Andreev bound states using $YBa_2Cu_3O_{7-y}/Ag$ ramp-edge junctions with different interface geometries* *Phys. Rev. B* **60** 4272–4276(1999) .

- [25] I. Iguchi, W. Wang, M. Yamazaki, Y. Tanaka, and S. Kashiwaya, *Angle – resolved Andreev bound states in anisotropic d-wave high – T_c $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ superconductors* *Phys. Rev. B* **62** R6131–R6134(2000) .
- [26] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, *Theory of Tunneling Spectroscopy of d-Wave Superconductors* *Phys. Rev. Lett.* **74** 3451–3454(1995) .
- [27] S. Kashiwaya, Y. Tanaka, M. Koyanagi, and K. Kajimura, *Theory for tunneling spectroscopy of anisotropic superconductors* *Phys. Rev. B* **53** 2667–2676(1996) .
- [28] C. Hu, *Midgap surface states as a novel signature for $d_{x^2-y^2}$ -wave superconductivity* *Phys. Rev. Lett.* **72** 1526–1529(1994) .
- [29] J. Yang and C. Hu, *Robustness of the midgap states predicted to exist on a 110 surface of a $d_{x^2-y^2}$ – wave superconductor* *Phys. Rev. B* **50** 16766–16769(1994) .
- [30] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, *Theory of Josephson effects in anisotropic superconductors* *Phys. Rev. B* **56** 892–912(1997) .
- [31] T. Löfwander, G. Johansson, M. Hurd, and G. Wendin, *Superconducting d-wave junctions: The disappearance of the odd ac components* *Phys. Rev. B* **57** R3225–R3228(1998) .
- [32] M. Hurd, *Current-voltage relation for superconducting d-wave junctions* *Phys. Rev. B* **55** R11993–R11996(1997) .
- [33] T. Löfwander, V. S. Shumeiko, and G. Wendin, *Time-reversal symmetry breaking at Josephson tunnel junctions of purely d-wave superconductors* *Phys. Rev. B* **62** R14653–R14656(2000) .
- [34] M. Hurd, T. Löfwander, G. Johansson, and G. Wendin, *ac Josephson effect in superconducting d-wave junctions* *Phys. Rev. B* **59** 4412–4426(1999) .
- [35] D. Wang, Y. Wan, and Q.-H. Wang, *Model for Determining the Pairing Symmetry and Relative Sign of the Energy Gap of Iron - Arsenide Superconductors using Tunneling Spectroscopy* *Phys. Rev. Lett.* **102** 197004(2009) .
- [36] X. Feng and T. Ng, *In-gap bound states and tunneling conductance of multiband superconductors through a normal/superconductor/superconductor junction* *Phys. Rev. B* **79** 184503(2009) .
- [37] J. Linder and A. Sudbø, *Theory of Andreev reflection in junctions with iron-based high- T_c superconductors* *Phys. Rev. B* **79** 020501(2009) .
- [38] S. Kashiwaya and Y. Tanaka, *Tunnelling effects on surface bound states in unconventional superconductors* *Rep. Prog. Phys.* **63** 1641(2000) .
- [39] T. Löfwander, V. S. Shumeiko, and W. G., *Andreev bound states in high- T_c superconducting junctions* *Supercond. Sci. Technol.* **14** R53(2001) .

- [40] A. Levy-Yeyati, A. Bergeret, F. S. Martín-Rodero, and T. M. Klapwijk, *Entangled Andreev pairs and collective excitations in nanoscale superconductors* *Nat. Phys.* **3** 455(2007) .
- [41] R. Mélin and D. Feinberg, *Sign of the crossed conductances at a ferromagnet / superconductor / ferromagnet double interface* *Phys. Rev. B* **70** 174509(2004) .
- [42] A. Brinkman and A. A. Golubov, *Crossed Andreev reflection in diffusive contacts: Quasiclassical Keldysh-Usadel formalism* *Phys. Rev. B* **74** 214512(2006) .
- [43] E. Prada and F. Sols, *Entangled electron current through finite size normal - superconductor tunneling structures* *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* **40** 379–396(2004) .
- [44] D. Beckmann, H. B. Weber, and H. Löhneysen, *Evidence for Crossed Andreev Reflection in Superconductor-Ferromagnet Hybrid Structures* *Phys. Rev. Lett.* **93** 197003(2004) .
- [45] T. Yamashita, S. Takahashi, and S. Maekawa, *Crossed Andreev reflection in structures consisting of a superconductor with ferromagnetic leads* *Phys. Rev. B* **68** 4504(2003) .
- [46] R. Mélin and S. Peysson, *Crossed Andreev reflection at ferromagnetic domain walls* *Phys. Rev. B* **68** 4515(2003) .
- [47] P. Recher and D. Loss, *Dynamical Coulomb Blockade and Spin-Entangled Electrons* *Phys. Rev. Lett.* **91** 7003(2003) .
- [48] S. Russo, M. Kroug, T. M. Klapwijk, and A. F. Morpurgo, *Experimental Observation of Bias-Dependent Nonlocal Andreev Reflection* *Phys. Rev. Lett.* **95** 027002(2005) .
- [49] W. J. Herrera, A. Levy-Yeyati, and A. Martín-Rodero, *Long-range crossed Andreev reflections in high-temperature superconductors* *Phys. Rev. B* **79** 014520(2009) .
- [50] I. B. Sperstad, J. Linder, and A. Sudbø, *Quantum transport in ballistic s_{\pm} - wave superconductors with interband coupling: Conductance spectra, crossed Andreev reflection, and Josephson current* *Phys. Rev. B* **80** 144507(2009) .
- [51] P. Cadden-Zimansky and V. Chandrasekhar, *Nonlocal Correlations in Normal-Metal Superconducting Systems* *Phys. Rev. Lett.* **97** 237003(2006) .
- [52] L. G. Herrmann, F. Portier, P. Roche, A. L. Yeyati, T. Kontos, and C. Strunk, *Carbon Nanotubes as Cooper-Pair Beam Splitters* *Phys. Rev. Lett.* **104** 026801(2010) .
- [53] L. Hofstetter, S. Csonka, J. Nygard, and C. Schonenberger, *Cooper pair splitter realized in a two-quantum-dot Y-junction* *Nature* **461** 960(2009) .
- [54] A. H. Castro Neto, *Graphene: Phonons behaving badly* *Nat. Mater.* **6** 176–177(2007) .
- [55] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Two – dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene* *Nature* **438** 197(2005) .
- [56] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, *Phys. Rev.* **71** 622–634(1947) .

- [57] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, *Band Structure of Graphite* *Phys. Rev.* **109** 272–279(1958) .
- [58] H. B. Heersche, P. Jarillo-Herrero, J. B. Oostinga, L. M. Vandersypen, and A. F. Morpurgo, *Bipolar supercurrent in graphene* *Nature* **446** 56 – 59(2007) .
- [59] X. Du, I. Skachko, and E. Y. Andrei, *Josephson current and multiple Andreev reflections in graphene SNS junctions* *Phys. Rev. B* **77** 184507(2008) .
- [60] C. W. Beenakker, *Specular Andreev Reflection in Graphene* *Phys. Rev. Lett.* **97** 067007(2006) .
- [61] S. Bhattacharjee and K. Sengupta, *Tunneling Conductance of Graphene NIS Junctions* *Phys. Rev. Lett.* **97** 217001(2006) .
- [62] A. R. Akhmerov and C. W. Beenakker, *Pseudodiffusive conduction at the Dirac point of a normal-superconductor junction in graphene* *Phys. Rev. B* **75** 045426(2007) .
- [63] J. Linder and A. Sudbø, *Dirac Fermions and Conductance Oscillations in s- and d-Wave Superconductor-Graphene Junctions* *Phys. Rev. Lett.* **99** 147001(2007) .
- [64] J. Linder and A. Sudbø, *Tunneling conductance in s - and d -wave superconductor - graphene junctions: Extended Blonder – Tinkham – Klapwijk formalism* *Phys. Rev. B* **77** 064507(2008) .
- [65] Z. Zhang, *Differential conductance through a NINS junction on graphene* *Journal of Physics: Condensed Matter* **20** 445220(2008) .
- [66] T. Dirks, S. Hughes, T. Lal, B. Uchoa, Y. F. Chen, C. Chialvo, P. M. Goldbart, and N. Mason, *Transport through Andreev bound states in a graphene quantum dot* *Nat. Phys.* **7** 386(2011) .
- [67] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene* *Nat. Phys.* **2** 620(2006) .
- [68] A. F. Young and P. Kim, *Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions* *Nat. Phys.* **5** 222(2009) .
- [69] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon, *Evidence for Klein Tunneling in Graphene p-n Junctions* *Phys. Rev. Lett.* **102** 026807(2009) .
- [70] H. B. Heersche, P. Jarillo-Herrero, J. B. Oostinga, L. M. K. Vandersypen, and A. F. Morpurgo, *Bipolar supercurrent in graphene* *Nature* **446** 56–59(2007) .
- [71] L. Brey and H. A. Fertig, *Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation* *Phys. Rev. B* **73** 235411(2006) .
- [72] a. . Girit, J. C. Meyer, R. Erni, M. D. Rossell, C. Kisielowski, L. Yang, C.-H. Park, M. F. Crommie, M. L. Cohen, S. G. Louie, and A. Zettl, *Graphene at the Edge: Stability and Dynamics* *Science* **323** 1705–1708(2009) .

- [73] Z. Liu, K. Suenaga, P. J. F. Harris, and S. Iijima, *Open and Closed Edges of Graphene Layers* *Phys. Rev. Lett.* **102** 015501(2009) .
- [74] B. Özyilmaz, P. Jarillo-Herrero, D. Efetov, D. A. Abanin, L. S. Levitov, and P. Kim, *Electronic Transport and Quantum Hall Effect in Bipolar Graphene p-n-p Junctions* *Phys. Rev. Lett.* **99** 166804(2007) .
- [75] R. V. Gorbachev, A. S. Mayorov, A. K. Savchenko, D. W. Horsell, and F. Guinea, *Conductance of p-n-p Graphene Structures with “Air - Bridge” Top Gates* *Nano Letters* **8** 1995(2008) .
- [76] J. Velasco Jr, G. Liu, W. Bao, and C. N. Lau, *Electrical transport in high-quality graphene pnp junctions* *New Journal of Physics* **11** 095008(2009) .
- [77] V. V. Cheianov, V. Fal’ko, and B. L. Altshuler, *The Focusing of Electron Flow and a Veselago Lens in Graphene p-n Junctions* *Science* **315** 1252(2007) .
- [78] J. Cserti, A. Pályi, and C. Péterfalvi, *Caustics due to a Negative Refractive Index in Circular Graphene p-n Junctions* *Phys. Rev. Lett.* **99** 246801(2007) .
- [79] J. Cayssol, *Crossed Andreev Reflection in a Graphene Bipolar Transistor* *Phys. Rev. Lett.* **100** 147001(2008) .
- [80] C. Benjamin and J. K. Pachos, *Detecting entangled states in graphene via crossed Andreev reflection* *Phys. Rev. B* **78** 235403(2008) .
- [81] J. Linder, M. Zareyan, and A. Sudbø, *Spin-switch effect from crossed Andreev reflection in superconducting graphene spin valves* *Phys. Rev. B* **80** 014513(2009) .
- [82] W. Herrera and V. Niño, *Andreev Levels in Anisotropic S-N-S Junctions* *Phys. Stat. Sol. (b)* **220** 551(2000) .
- [83] J. C. Cuevas, A. Martín-Rodero, and A. Levy-Yeyati, *Hamiltonian approach to the transport properties of superconducting quantum point contacts* *Phys. Rev. B* **54** 7366–7379(1996) .
- [84] R. Khasanov, A. Shengelaya, J. Karpinski, A. Bussmann-Holder, H. Keller, and K. Müller, *s-Wave Symmetry Along the c-Axis and s + d In-plane Superconductivity in Bulk YBa₂Cu₄O₈* *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **21** 81–85(2008) .
- [85] W. E. Pickett, *Single Spin Superconductivity* *Phys. Rev. Lett.* **77** 3185–3188(1996) .
- [86] Y. Tanaka and S. Kashiwaya, *Local density of states of quasiparticles near the interface of nonuniform d-wave superconductors* *Phys. Rev. B* **53** 9371–9381(1996) .
- [87] B. Goss, *In High-T_C Superconductors, is D – Wave the New Wave?* *Physics Today* **46** 17–20(1993) .
- [88] M. C. Schabel, C. H. Park, A. Matsuura, Z. X. Shen, D. A. Bonn, R. Liang, and W. N. Hardy, *Superconducting-gap anisotropy in YBa₂Cu₃O_{7-δ}:mPhotoemission results on untwinned crystals* *Phys. Rev. B* **55** 2796–2799(1997) .

- [89] K. Hashimoto, T. Shibauchi, T. Kato, K. Ikada, R. Okazaki, H. Shishido, M. Ishikado, H. Kito, A. Iyo, H. Eisaki, S. Shamoto, and Y. Matsuda, *Microwave Penetration Depth and Quasiparticle Conductivity of PrFeAsO_{1-y} Single Crystals: Evidence for a Full-Gap Superconductor* *Phys. Rev. Lett.* **102** 017002(2009) .
- [90] D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, J. Giapintzakis, and D. M. Ginsberg, *Evidence for $d_{x^2-y^2}$ Pairing from the Magnetic Field Modulation of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ -Pb Josephson Junctions* *Phys. Rev. Lett.* **74** 797–800(1995) .
- [91] W. Tsai, D. Yao, B. Bernevig, and J. Hu, *Properties of Josephson junctions involving the $\cos(k_x) \cdot \cos(k_y)$ pairing state in iron pnictides* *Phys. Rev. B* **80** 012511(2009) .
- [92] B. Chesca, R. R. Schulz, B. Goetz, C. W. Schneider, H. Hilgenkamp, and J. Mannhart, *d-Wave Induced Zero-Field Resonances in dc π -Superconducting Quantum Interference Devices* *Phys. Rev. Lett.* **88** 177003(2002) .
- [93] J. R. Kirtley, C. C. Tsuei, J. Z. Sun, C. C. Chi, L. S. Yu-Jahnes, A. Gupta, M. Rupp, and M. B. Ketchen, *Symmetry of the order parameter in the high- T_c superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$* *Nature* **373** 225–228(1995) .
- [94] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, C. C. Chi, L. S. Yu-Jahnes, A. Gupta, T. Shaw, J. Z. Sun, and M. B. Ketchen, *Pairing Symmetry and Flux Quantization in a Tricrystal Superconducting Ring of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$* *Phys. Rev. Lett.* **73** 593–596(1994) .
- [95] D. J. Van Harlingen, *Phase-sensitive tests of the symmetry of the pairing state in the high-temperature superconductors—Evidence for $d_{x^2-y^2}$ symmetry* *Rev. Mod. Phys.* **67** 515–535(1995) .
- [96] M. M. Parish, J. Hu, and B. A. Bernevig, *Experimental consequences of the s -wave $\cos(k_x)\cos(k_y)$ superconductivity in the iron pnictides* *Phys. Rev. B* **78** 144514(2008) .
- [97] K. Matano, Z. A. Ren, X. L. Dong, L. L. Sun, Z. X. Zhao, and G.-q. Zheng, *Spin – singlet superconductivity with multiple gaps in $\text{PrFeAsO}_{0.89}\text{F}_{0.11}$* *EPL (Europhysics Letters)* **83** 57001(2008) .
- [98] W. J. Tomasch, *Geometrical Resonance in the Tunneling Characteristics of Superconducting Pb* *Phys. Rev. Lett.* **15** 672–675(1965) .
- [99] W. L. McMillan and P. W. Anderson, *Theory of Geometrical Resonances in the Tunneling Characteristics of Thick Films of Superconductors* *Phys. Rev. Lett.* **16** 85–87(1966) .
- [100] T. Wolfram, *Tomasch Oscillations in the Density of States of Superconducting Films* *Phys. Rev.* **170** 481–490(1968) .
- [101] W. L. McMillan, *Theory of Superconductor – Normal – Metal Interfaces* *Phys. Rev.* **175** 559–568(1968) .
- [102] O. Neshet and G. Koren, *Observation of Tomasch oscillations and tunneling – like behavior in oxygen – deficient edge junctions* *Appl. Phys. Lett.* **74** 3392(1999) .

- [103] I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes, and M. H. Du, *Unconventional Superconductivity with a Sign Reversal in the Order Parameter of $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$* *Phys. Rev. Lett.* **101** 057003(2008) .
- [104] V. B. Zabolotnyy, D. S. Inosov, D. V. Evtushinsky, A. Koitzsch, A. A. Kordyuk, G. L. Sun, J. T. Park, D. Haug, V. Hinkov, A. V. Boris, C. T. Lin, M. Knupfer, A. N. Yaresko, B. Buchner, A. Varykhalov, R. Follath, and S. V. Borisenko, *(π, π) electronic order in iron arsenide superconductors* *Nature* **457** 569 – 572(2009) .
- [105] A. F. Andreev, *Thermal conductivity of the intermediate state of superconductors* *Sov. Phys. JETP* **19** 1228(1964) .
- [106] A. F. Andreev, *Electron spectrum of the intermediate state of superconductors* *Sov. Phys. JETP* **22** 455(1966) .
- [107] J. Bardeen and J. L. Johnson, *Josephson Current Flow in Pure Superconducting – Normal – Superconducting Junctions* *Phys. Rev. B* **5** 72–78(1972) .
- [108] M. Wagenknecht, D. Koelle, R. Kleiner, S. Graser, N. Schopohl, B. Chesca, A. Tsukada, S. T. B. Goennenwein, and R. Gross, *Phase Diagram of the Electron-Doped $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ Cuprate Superconductor from Andreev Bound States at Grain Boundary Junctions* *Phys. Rev. Lett.* **100** 227001(2008) .
- [109] B. Chesca, M. Seifried, T. Dahm, N. Schopohl, D. Koelle, R. Kleiner, and A. Tsukada, *Observation of Andreev bound states in bicrystal grain-boundary Josephson junctions of the electron-doped superconductor $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$* *Phys. Rev. B* **71** 104504(2005) .
- [110] C. W. Beenakker, *Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene* *Rev. Mod. Phys.* **80** 1337–1354(2008) .
- [111] W. J. Herrera, *Tesis de Doctorado*. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2005.
- [112] M. S. Kalenkov and A. D. Zaikin, *Crossed Andreev reflection at spin-active interfaces* *Phys. Rev. B* **76** 224506(2007) .
- [113] Y. Takagaki and K. H. Ploog, *Quantum point contact spectroscopy of d-wave superconductors* *Phys. Rev. B* **60** 9750–9754(1999) .
- [114] D. Feinberg, *Andreev scattering and cotunneling between two superconductor-normal metal interfaces: the dirty limit* *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* **36** 419–422(2003) .
- [115] T. Ando, *The electronic properties of graphene and carbon nanotubes*, *NPG Asia Materials* **1** 17–21(2009) .
- [116] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón, *Tight-binding description of graphene*, *Phys. Rev. B* **66** 035412(2002) .
- [117] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, J. Graf, A. V. Fedorov, C. D. Spataru, R. D. Diehl, Y. Kopelevich, D.-H. Lee, S. G. Louie, and A. Lanzara, *First direct observation of Dirac fermions in graphite*, *Nat. Phys.* **2** 595(2006) .

- [118] A. Bostwick, T. Ohta, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, *Quasiparticle dynamics in graphene*, *Nat. Phys.* **3** 36–40(2007) .
- [119] Y. Barash, I. V. Bobkova, B. M. Andersen, T. Kopp, and P. J. Hirschfeld, *Superconducting Junctions with Ferromagnetic, Antiferromagnetic or Charge – Density – Wave Interlayers* *AIP Conference Proceedings* **850** 889–890(2006) .
- [120] A. Bulgac, P. Magierski, and A. Wirzba, *Fermionic Casimir effect in case of Andreev reflection* *Europhys. Lett.* **72** 327–333(2005) .
- [121] G. E. Blonder, M. Tinkham, and T. M. Klapwijk, *Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: Excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion* *Phys. Rev. B* **25** 4515–4532(1982) .
- [122] N. Agraït, A. Levy-Yeyati, and J. M. van Ruitenbeek, *Quantum properties of atomic – sized conductors* *Physics Reports* **377** 81 – 279(2003) .
- [123] A. Martín-Rodero, J. C. Cuevas, A. Levy-Yeyati, R. Cron, M. F. Goffman, D. Esteve, and C. Urbina, “Quantum Noise.,” in *Microscopic Physics* 57–71, Y. V. Nazarov, ed. (Kluwer Academia publisher), 2003.
- [124] J. C. Cuevas, A. Martín-Rodero, and A. Levy-Yeyati, *Shot Noise and Coherent Multiple Charge Transfer in Superconducting Quantum Point Contacts* *Phys. Rev. Lett.* **82** 4086–4089(1999) .
- [125] W. J. Herrera, *Tesis de Maestría*. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2000.
- [126] T. Takahashi, T. Sato, H. Matsui, and K. Terashima, *High-resolution ARPES study of quasi-particles in high- T_c superconductors* *New J. Phys.* **7** 105(2005) .
- [127] J. Bardeen, R. Kümmel, A. E. Jacobs, and L. Tewordt, *Structure of Vortex Lines in Pure Superconductors* *Phys. Rev.* **187** 556–569(1969) .
- [128] C. Bruder, *Andreev scattering in anisotropic superconductors* *Phys. Rev. B* **41** 4017–4032(1990) .
- [129] S. Kashiwaya, Y. Tanaka, M. Koyanagi, H. Takashima, and K. Kajimura, *Origin of zero-bias conductance peaks in high- T_c superconductors* *Phys. Rev. B* **51** 1350–1353(1995) .
- [130] A. H. Castro-Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *The electronic properties of graphene* *Rev. Mod. Phys.* **81** 109–162(2009) .
- [131] M. Wilson, *Electrons in Atomically Thin Carbon Sheets Behave Like Massless Particles*, *Phys. Today* **59** 21–23(2006) .
- [132] A. Shailos, W. Nativel, A. Kasumov, C. Collet, M. Ferrier, S. Guéron, R. Deblock, and H. Bouchiat, *Proximity effect and multiple Andreev reflections in few-layer graphene* *EPL (Europhysics Letters)* **79** 57008(2007) .
- [133] P. Burset, A. Levy-Yeyati, and A. Martín-Rodero, *Microscopic theory of the proximity effect in superconductor – graphene nanostructures* *Phys. Rev. B* **77** 205425(2008) .

- [134] K. Capelle and E. K. Gross, *Relativistic framework for microscopic theories of superconductivity. II. The Pauli equation for superconductors* *Phys. Rev. B* **59** 7155–7165(1999) .
- [135] V. Niño and R. Kümmel, *Quantum stability and screening in superconducting metallic weak links* *Phys. Rev. B* **29** 3957(1984) .
- [136] Y. Nambu, *Quasi – Particles and Gauge Invariance in the Theory of Superconductivity* *Phys. Rev.* **117** 648–663(1960) .
- [137] E. Butkov, *Mathematical Physics*. Addison Wesley, 1968.
- [138] J. Linderberg and Y. Öhrn, *Propagator in quantum chemistry*. Academic Press, 1973.
- [139] A. Furusaki and M. Tsukada, *Dc Josephson effect and Andreev reflection* *Solid State Cummun.* **78** 299(1991) .
- [140] P. Burset, W. J. Herrera, and A. Levy-Yeyati, *A Green function approach to graphene - superconductor junctions with well - defined edges* *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 275304(2010) .
- [141] H. Bruus and K. Flensberg, *Introduction to many - body quantum theory in condensed matter physics*. Orsted Laboratory, Class notes, Copenhagen, 2002.
- [142] F. J. Dyson, *The S matrix in quantum electrodynamics* *Phys. Rev.* **75** 1736(1949) .
- [143] A. Martín-Rodero, *Notas del curso de doctorado, cap 8*. Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, 2000.
- [144] W. Greiner and J. Reinhardt, *Field Quantization*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1966.
- [145] J. Y. Wei, N. C. Yeh, D. F. Garrigus, and M. Strasik, *Directional Tunneling and Andreev Reflection on YBa₂Cu₃O_{7- δ} Single Crystals: Predominance of d – Wave Pairing Symmetry Verified with the Generalized Blonder, Tinkham, and Klapwijk Theory* *Phys. Rev. Lett.* **81** 2542–2545(1998) .
- [146] L. Shkedy, P. Aronov, G. Koren, and E. Polturak, *Observation of McMillan-Rowell like oscillations in underdoped YBa₂Cu₃O_y junctions oriented along the node of the d -wave order parameter* *Phys. Rev. B* **69** 132507(2004) .
- [147] W. Herrera, V. Niño, and J. Giraldo, *Local Density of States in Anisotropic N - S - N and N - I - S - N Junctions* *Phys. Stat. Sol. (b)* **230** 491(2002) .
- [148] S. Gómez, *Tesis de Maestría*. Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2007.
- [149] S. Gómez, W. J. Herrera, and J. V. Niño, *Study of transport properties in superconducting junctions of double insulating barrier* *Physica B: Condensed Matter* **404** 2787(2009) .

- [150] I. Asulin, O. Yuli, G. Koren, and O. Millo, *Evidence for crossed Andreev reflections in bilayers of (100) $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ and the itinerant ferromagnet $SrRuO_3$* *Phys. Rev. B* **74** 092501(2006) .
- [151] W. J. Herrera, *Trabajo de Grado*. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 1997.
- [152] S. Gómez, W. J. Herrera, J. V. Niño, and D. A. Manjarrés, *Crossed Andreev reflection in superconducting junctions* *Microelectron. J.* **39** 1231(2008) .
- [153] F. Wang and D.-H. Lee, *The Electron - Pairing Mechanism of Iron - Based Superconductors* *Science* **332** 200(2011) .
- [154] A. A. Golubov, A. Brinkman, Y. Tanaka, I. I. Mazin, and O. V. Dolgov, *Andreev Spectra and Subgap Bound States in Multiband Superconductors* *Phys. Rev. Lett.* **103** 077003(2009) .
- [155] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, , D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Electric field effect in atomically thin carbon films.* *Science.* **306** 666(2004) .
- [156] M. F. Duque, *Tesis de Maestría*. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2011.
- [157] S. Bhattacharjee, M. Maiti, and K. Sengupta, *Theory of tunneling conductance of graphene normal metal-insulator-superconductor junctions* *Phys. Rev. B* **76** 184514(2007) .
- [158] D. A. Manjarrés, W. J. Herrera, and S. Gómez, *Andreev levels in a graphene - superconductor surface* *Physica B: Condensed Matter* **404** 2799(2009) .
- [159] V. G. Veselago, *The Electrodynamics Of Substances With Simultaneously Negative Values of ϵ And μ* *Sov. Phys. Usp.* **10** 509(1968) .
- [160] A. G. Moghaddam and M. Zareyan, *Graphene-Based Electronic Spin Lenses* *Phys. Rev. Lett.* **105** 146803(2010) .
- [161] Y. Xing, J. Wang, and Q.-f. Sun, *Focusing of electron flow in a bipolar graphene ribbon with different chiralities* *Phys. Rev. B* **81** 165425(2010) .
- [162] F. Hassler, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, *Flat-lens focusing of electrons on the surface of a topological insulator* *Phys. Rev. B* **82** 125423(2010) .
- [163] F. Miao, S. Wijeratne, Y. Zhang, U. C. Coskun, W. Bao, and C. N. Lau, *Phase-Coherent Transport in Graphene Quantum Billiards* *Science* **317** 1530–1533(2007) .
- [164] X. Du, I. Skachko, and E. Y. Andrei, *Josephson current and multiple Andreev reflections in graphene SNS junctions* *Phys. Rev. B* **77** 184507(2008) .
- [165] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, V. M. Karpan, J. van den Brink, and P. J. Kelly, *Doping Graphene with Metal Contacts* *Phys. Rev. Lett.* **101** 026803(2008) .
- [166] M. L. Shendeleva, *Caustics in a field negatively refracted at a plane interface* *Journal of Microscopy* **229** 452(2008) .

Declaración

Me permito afirmar que he realizado la presente tesis de manera autónoma y con la única ayuda de los medios permitidos y no diferentes a los mencionados en la propia tesis. Todos los pasajes que se han tomado de manera textual o figurativa de textos publicados y no publicados, los he reconocido en el presente trabajo. Ninguna parte del presente trabajo se ha empleado en ningún otro tipo de tesis.

Bogotá, D.C., 17.05.2012

Shirley Gómez Paez